

# Doppelt hoch angeregte Zustände von Helium: Partielle Wirkungsquerschnitte und Winkelverteilungen der Elektronenemission

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik  
der Johann Wolfgang Goethe-Universität  
in Frankfurt am Main

von  
**Achim Czasch**  
aus Frankfurt am Main

Frankfurt am Main, 2004  
(DF1)

vom Fachbereich Physik der  
Johann Wolfgang Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan: Professor W. Aßmus

1. Gutachter: Professor H. Schmidt-Böcking

2. Gutachter: Professor R. Dörner

Datum der Disputation: 28.05.2004



Für meine Familie

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Motivation</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1	Doppelt angeregte Zustände von Helium . . . . .	5
2.1.1	Die $(2n+)$ - und die $(2n-)$ -Serie . . . . .	8
2.1.2	Die dritte Serie $(2pnd)$ . . . . .	9
2.1.3	Das Fano-Profil . . . . .	11
2.1.4	Überlappende Serien oberhalb von $N \geq 5$ . . . . .	12
2.2	Die neuen Quantenzahlen $(K, T)^A$ . . . . .	13
2.3	Numerische Berechnungsverfahren . . . . .	17
2.3.1	Close-Coupling-Rechnungen . . . . .	17
2.3.2	Die R-Matrix-Methode . . . . .	19
2.3.3	Die Complex-Rotation-Methode . . . . .	20
2.4	Winkelverteilungen: Der $\beta$ -Parameter . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Traditionelle Meßmethoden</b>	<b>22</b>
3.1	Nachweis von totalen Wirkungsquerschnitten . . . . .	22
3.2	Partielle Wirkungsquerschnitte und Winkelverteilungen . . . . .	24
3.2.1	Messungen mit Flugzeitspektrometern . . . . .	24
3.2.2	Messungen mit elektrostatischen Ablenkanalysatoren . . . . .	26
3.2.3	Partielle Wirkungsquerschnitte $\sigma_N$ und $\beta_N$ für $He_{(N>2)}^+$ . . . . .	27
3.3	Die Notwendigkeit einer neuen Technik . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Das Meßprinzip</b>	<b>31</b>
4.1	Übersicht . . . . .	32
4.2	Strahlführung . . . . .	33
4.3	Das Vakuumsystem . . . . .	35
4.4	Das Gastarget . . . . .	36
4.5	Das Spektrometer . . . . .	40
4.6	Die Detektoren . . . . .	43
4.7	Der Meßplatz am Synchrotron BessyII . . . . .	47
4.8	Signalverarbeitung und Monochromatorsteuerung . . . . .	48

<b>5</b>	<b>Datenauswertung</b>	<b>52</b>
5.1	Das Koordinatensystem . . . . .	52
5.2	Impulsberechnung im Erdmagnetfeld . . . . .	53
5.3	Kalibrierung . . . . .	58
5.3.1	Kriterien der Kalibrierung . . . . .	58
5.3.2	Ortsnullpunkte . . . . .	59
5.3.3	Zeitnullpunkt . . . . .	59
5.3.4	Das Erdmagnetfeld . . . . .	61
5.3.5	Kalibrierung der Winkelverteilung . . . . .	63
5.3.6	Der Polarisationsgrad (Stokesparameter) . . . . .	63
5.3.7	Kalibrierung der Photonenenergie bzw. der Energieauflösung . .	65
5.3.8	Ergebnisse der Kalibrierung . . . . .	66
5.4	Untergrundreduktion . . . . .	66
5.4.1	Erster Schritt: Grobe Selektion während der Aufnahme . . . . .	67
5.4.2	Zweiter Schritt: Genaue Selektion während der Datenauswertung	68
<b>6</b>	<b>Durchführung der Messung</b>	<b>71</b>
6.1	Aufbereitung der Daten . . . . .	71
6.2	Fehlerdiskussion . . . . .	75
<b>7</b>	<b>Die Ergebnisse der Messung</b>	<b>79</b>
7.1	Partielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	79
7.1.1	Vergleich mit theoretischen Rechnungen (Rost <i>et al.</i> ) . . . . .	83
7.2	Winkelverteilungen ( $\beta$ -Parameter) . . . . .	89
7.2.1	Vergleich mit theoretischen Rechnungen von Greene . . . . .	92
7.2.2	Vergleich mit der Doppelionisation über 79 eV (Dörner <i>et al.</i> ) .	93
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>96</b>
<b>A</b>	<b>Simulation des Spektrometers</b>	<b>100</b>
<b>B</b>	<b>Erzeugung von Synchrotronstrahlung</b>	<b>107</b>
<b>C</b>	<b>Faltung der theoretischen Daten</b>	<b>115</b>
<b>D</b>	<b>Wichtige Kennzahlen des Experiments</b>	<b>116</b>



# Kapitel 1

## Einleitung und Motivation

Spätestens seit den Arbeiten von Poincaré [1, 2] Ende des 19. Jahrhunderts ist bekannt, daß die Bewegungsgleichungen des klassischen Dreikörperproblems nicht analytisch gelöst werden können. Nur in sehr wenigen Fällen können geschlossene Bahnen im dazugehörigen Phasenraum gefunden werden<sup>1</sup>. Die Struktur dieses Phasenraums ist daher weitgehend chaotisch. Er kann jedoch in manchen Fällen in Bereiche eingeteilt werden, die nicht untereinander verbunden sind. Sonne, Erde und Mond sind ein gutes Beispiel dafür, daß solche abgeschlossenen Teilbereiche existieren. Die Tatsache jedoch, daß die Bewegung eines Dreikörpersystems allgemein nicht analytisch für alle Zeiten beschrieben werden kann, war mit der damaligen mechanistischen Weltvorstellung unvereinbar.

Nur wenige Jahrzehnte später tauchte das Dreikörperproblem in einem völlig anderen Gebiet der Physik wieder auf. Nachdem das Spektrum des Wasserstoffatoms mit Hilfe der Quantisierungsregeln von Bohr und Sommerfeld sehr erfolgreich beschrieben werden konnte, mußte festgestellt werden, daß ihre direkte Anwendung auf das Heliumatom mit großen Schwierigkeiten verbunden war. Noch nicht einmal die Grundzustandsenergie konnte auf Anhieb befriedigend reproduziert werden. Dieser Befund war sehr ernüchternd, da Helium nach Wasserstoff eines der einfachsten quantenmechanischen Systeme ist. Dieses Problem konnte erst im Rahmen der neu entwickelten Quantenmechanik mit Erfolg behandelt werden. Doch auch hier mußte festgestellt werden, daß das Problem des Heliumatoms nicht exakt gelöst werden kann. Das Hindernis, das einer analytischen Lösung der Schrödingergleichung des Heliumatoms im Wege steht, sind die abstoßenden Kräfte zwischen den Elektronen, die vom Betrag her der anziehenden Wirkung des Kerns entsprechen.

In den darauf folgenden Jahrzehnten zeigte sich, daß das Heliumatom in eine Vielzahl von Zuständen angeregt werden kann. Madden und Codling haben durch ihre Experimente 1963 [8, 9] den Grundstein für die detaillierte Untersuchung dieser Zustände gelegt. Sie untersuchten die Einfachionisation von Helium durch Absorption von Pho-

---

<sup>1</sup>Ein Beispiel für einen solchen geschlossenen Orbit sind drei gleich schwere Massenpunkte, die sich auf einer Kreisbahn um das gemeinsame Massenzentrum bewegen und dabei ein gleichschenkliges Dreieck bilden.

tonen. Dabei entdeckten sie eine ganze Serie von doppelt angeregten Zuständen, deren Energien über der Einfachionisationsschwelle liegen. Es handelt sich dabei um doppelt angeregte Zustände. Sie können einige Zeit existieren bevor ein Energieaustausch zwischen den Elektronen schließlich zum Zerfall führt. Während eines solchen Zerfalls erhält ein Elektron zusätzliche Energie vom anderen und kann dadurch ins Kontinuum entkommen.<sup>2</sup> Das andere Elektron sinkt daraufhin in einen niederenergetischen Zustand ab, so daß ein eventuell angeregtes  $He^+$ -Ion zurückbleibt. Der Zerfall solcher Zustände wird Autoionisation genannt. Im Spektrum der Einfachionisation werden diese Zustände in Form von Resonanzen sichtbar.

In den folgenden Jahren wurden viele weitere Resonanzserien gefunden. Ihre Anzahl nimmt zur Doppelionisationsschwelle (79 eV) hin stark zu. Vor allem der Bereich zwischen 78 eV und 79 eV ist von besonderem Interesse, da hier die Resonanzen aufgrund ihrer hohen Zahl beginnen, sich gegenseitig zu überschneiden und miteinander zu interferieren.

Parallel zu den experimentellen Untersuchungen wurden verschiedene Berechnungsmethoden entwickelt, um die Eigenschaften des Heliumatoms theoretisch beschreiben zu können. Dabei zeigte sich, daß dieser unüberschaubaren Menge von Resonanzen eine geordnete Struktur zugrunde liegt, die durch fünf Quantenzahlen beschrieben werden kann [15, 23, 24].

Die Existenz dieser Quantenzahlen ist von großer Bedeutung. Klassisch betrachtet ist der Phasenraum des Heliumatoms nämlich höchst chaotisch, und es existieren nur wenige abgeschlossene Unterräume<sup>3</sup>. Hinzu kommt die Tatsache, daß das klassische Heliumatom keinen stabilen Grundzustand besitzt, sondern nach kürzester Zeit ionisiert. Rein intuitiv scheint dies mit dem geordneten Spektrum des entsprechenden quantenmechanischen Systems unvereinbar.

Es ist daher im höchsten Maße verwunderlich, daß offensichtlich eine Vielzahl von hoch angeregten Zuständen existieren können und daß sie sogar durch einige wenige Quantenzahlen beschrieben werden. Wie kann dieses hohe Maß an Ordnung vor dem Hintergrund des chaotischen klassischen Pendants verstanden werden?

Seit einigen Jahren wird diskutiert, wie sich chaotisches Verhalten in quantenmechanischen Systemen bemerkbar machen sollte und ob solche Anzeichen im Spektrum der doppelt hoch angeregten Zustände von Helium gefunden werden können. Im Rahmen moderner Messungen [44, 56] sind noch keine konkreten Beweise dafür entdeckt worden.

In einer aktuellen Veröffentlichung [46] wird behauptet, im (berechneten) Spektrum der doppelt hoch angeregten Zustände erste Anzeichen von „Quantenchaos“ entdeckt zu haben. Diese Aussage stützt sich auf eine statistische Analyse<sup>4</sup> der Abstände zwischen

---

<sup>2</sup>Es gibt natürlich auch Zustände, die strahlend zerfallen.

<sup>3</sup>Ein Beispiel für solch einen Unterraum ist das sogenannte kolleare Heliumatom. Dabei halten sich alle drei Teilchen auf einer Linie auf. Die Elektronen befinden sich entweder beide auf einer Seite des Kerns oder jeweils zu beiden Seiten verteilt (eeZ- bzw. eZe-Konfiguration).

<sup>4</sup>Die Analyse der „Nearest neighbor spacing“-Verteilung (NNS) [3].

den berechneten Resonanzen. Die vorliegende Beweislage ist jedoch sehr schwach<sup>5</sup> und es ist nicht zweifelsfrei geklärt, ob diese Art der Analyse allein einen zwingenden Beweis für das Auftreten von chaotischem Verhalten liefern kann:

*„... the emergence of a Wigner-Distribution may be a necessary, but is by no means a sufficient, condition for the characterization of 'quantum chaos'.“ [4]*

Es wurde sogar die begründete Vermutung geäußert, daß in Helium prinzipiell kein chaotisches Verhalten vorliegt [5] und daher auch nicht nachgewiesen werden kann.

Dies zeigt, daß das Thema noch sehr kontrovers diskutiert wird. Des weiteren liegt keine einheitliche Definition vor, was eigentlich mit dem Begriff „Quantenchaos“ gemeint ist. Seit kurzer Zeit ist experimentell als auch theoretisch der Bereich zwischen 78 eV und 79 eV zugänglich geworden. Ermöglicht wurde dies durch neue technische Entwicklungen bei der Erzeugung von Synchrotronstrahlung<sup>6</sup> bzw. durch die hohe Rechenleistung, die mit heutigen Computern zur Verfügung steht.

Um letztendlich Klarheit in diese Thematik zu bringen, müssen in diesem Bereich weitere Experimente durchgeführt werden. Diese Messungen sind technisch höchst anspruchsvoll, da die zu beobachtenden Wirkungsquerschnitte im Bereich zwischen 78 eV und der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV äußerst schwach sind. Traditionelle Nachweismethoden versagen hier zunehmend aufgrund ihrer geringen Nachweiseffizienz.

Aus diesem Grund wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein neues Nachweissystem entwickelt, das ideal für Untersuchungen in diesem schwierigen Bereich geeignet ist. Während einer Messung am Berliner Synchrotron BESSY II wurde die Apparatur erfolgreich eingesetzt.

---

<sup>5</sup>Die Analyse wurde nicht mit experimentellen Daten durchgeführt, sondern basiert rein auf theoretischen Rechnungen. Es wird lediglich der Bezug zu einer Messung hergestellt, indem der gemessene totale Wirkungsquerschnitt mit der Rechnung verglichen wird (Abb. 2.7). Die gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment wird sodann als Legitimation angesehen, die Rechnung auch zu weitaus höheren Photonenenergien hin auszudehnen. Allerdings wird bei diesem Schritt das Modell, auf dem die Rechnung basiert, grundlegend geändert (Schritt vom 3D-Helium zum 1D-Helium). Nur in dieser Region finden sich dann erste Anzeichen auf chaotisches Verhalten. Hierbei kann jedoch bestenfalls von Anzeichen gesprochen werden und nicht von einem eindeutigen Befund.

<sup>6</sup>Hier ist insbesondere die hohe Energieschärfe gemeint, die es ermöglicht, auch sehr schmale Resonanzen abzubilden.

# Kapitel 2

## Grundlagen

Zentraler Aspekt dieser Arbeit sind Energieniveaus und Schwellen an verschiedenen Positionen im Energiespektrum des Heliumatoms. An dieser Stelle soll daher eine kurze Orientierung vorangestellt werden, auf der die späteren Abschnitte aufbauen können.

Um ein Heliumatom zu ionisieren wird Energie benötigt, um zumindest eines der beiden Elektronen zu entfernen. Die Bindungsenergie, die beim Ablösen nur eines der beiden Elektronen aufgebracht werden muß, beträgt 24,58 eV. Für das Ablösen des zweiten<sup>1</sup> Elektrons müssen bereits ca. 54,4 eV aufgewendet werden. Die geringere Bindungsenergie des ersten Elektron ergibt sich aus der Tatsache, daß das effektiv wirkende Potential aufgrund der Abschirmung des Kerns durch das zurückbleibende Elektron abgeschwächt wird.

Im Rahmen des Bohr'schen Atommodells kann die Bindungsenergie des zweiten Elektrons ausgerechnet werden zu

$$E(N) = R_y \frac{-Z^2}{N^2} \approx -54,4 \text{ eV} \quad (2.1)$$

mit der Kernladungszahl  $Z=2$  für Helium und der Hauptquantenzahl  $N=1$  des Grundzustandes des  $He^+$ -Ions.  $R_y$  ist die Rydbergkonstante mit  $R_y = 13,595 \text{ eV}$ .

Die zur Ionisation notwendige Energie kann beispielsweise durch die Kollision mit einem anderen Teilchen oder durch Absorption eines oder mehrerer Photonen auf das Atom übertragen werden. Im folgenden wird nur die Ionisation durch einzelne Photonen näher betrachtet. Mindestens 24,58 eV werden benötigt, um das erste Elektron ins Kontinuum zu heben. Liegt die Energie darunter, so kann lediglich ein einfach angeregter Zustand populierte werden. Überschüssige Energie dagegen wird aufgeteilt zwischen der kinetischen Energie des emittierten Elektron und der Anregung des zurückbleibenden  $He^+$ -Ions. In Abb. 2.1 sind die möglichen Anregungszustände des zurückbleibenden  $He^+$ -Ions aufgetragen zusammen mit der Photonenenergie, die benötigt wird, um diesen Zustand aus einem neutralen Heliumatom heraus zu erzeugen. Dieses Spektrum

---

<sup>1</sup>Mit „erstem“ und „zweitem“ Elektron ist lediglich die zeitliche Reihenfolge der Ionisation gemeint. Vor der Ionisation, d.h. im neutralen Heliumatom sind sie ununterscheidbar.



hat eine wasserstoffartige Struktur. Ab einer Energie von 24,58 eV kann ein Elektron abgelöst werden. Bis zu einer Energie von ca. 65,39 eV wird jegliche überschüssige Energie in Form von kinetischer Energie des emittierten Elektrons frei, da das zurückbleibende  $He^+$ -Ion in dieser Region keine angeregten Zustände annehmen kann. Erst ab einer Energie von ca. 65,39 eV kann zusätzlich zu Ionisation auch der erste angeregte Zustand des  $He^+$ -Ions mit der Hauptquantenzahl  $N=2$  bevölkert werden und ab ca. 72,94 eV dann  $N=3$  und so fort bis zur Doppelionisationsschwelle bei 79 eV. Ab 79

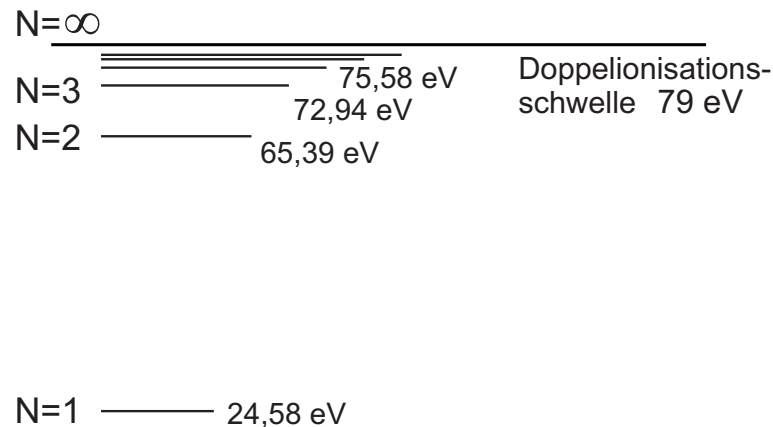


Abbildung 2.1: Der im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Energiebereich liegt zwischen 24,58 eV (Schwelle für Einfachionisation) und 79 eV (Doppelionisationsschwelle). Zur Einteilung dieses Bereiches eignen sich die verschiedenen Schwellen, an denen jeweils ein neuer Endzustand (N) des zurückbleibenden  $He^+$ -Ions angeregt werden kann. Beispielsweise sind mindestens 64,39 eV notwendig, um das eine Elektron abzulösen und das zurückbleibende  $He^+$ -Ion in den N=2-Zustand anzuregen.

eV steht genug Energie zur Verfügung, um beide Elektronen vom Kern abzulösen. Es gibt hier aber kein deutlich sichtbares Schwellenverhalten, d.h. die Rate der emittierten Elektronen steigt nicht sprunghaft an, und die Einfachionisation ist auch oberhalb von 79 eV weiterhin der dominante Effekt.

## 2.1 Doppelt angeregte Zustände von Helium

Im folgenden Abschnitt werden die autoionisierenden, doppelt angeregten Zustände des Heliumatoms diskutiert<sup>2</sup>. Die Einführung orientiert sich dabei an der historischen Entwicklung, da dadurch die verschiedenen Nomenklaturen der Zustände und die Klassen der Resonanz-Serien am verständlichsten dargestellt werden können.

In frühen Experimenten wurde der Energieverlust von Elektronen gemessen, die an Helium gestreut wurden [10, 12, 11] (1934, 1935, 1959). Dabei wurden Anregungs-Resonanzen von Helium gefunden, die zwischen den angeregten Zuständen  $N$  des  $He_{(N)}^+$ -Ions liegen, d.h. im Kontinuum oberhalb der Einfachionisationsschwelle von 24,58 eV. Die

<sup>2</sup>Gute Einführungen in das Thema sind die Review-Artikel [6] und [7].

Resonanzen wurden interpretiert als angeregte Zustände, die durch Autoionisation zerfallen. Diese Strukturen wurden 1963 detailliert von Madden und Codling [8] mit Hilfe von Synchrotronstrahlung untersucht (Abb. 2.2). Dabei zeigte sich, daß die Resonanzen tatsächlich die Form<sup>3</sup> aufweisen, die zuvor Fano 1961 [16] theoretisch abgeleitet hatte, um die Befunde aus den oben erwähnten Streuexperimenten zu interpretieren. Zum anderen zeigte sich, daß die Positionen der Resonanzen gegen die Energie des nächstgelegenen  $He_{(N)}^+$ -Zustandes konvergieren. Im folgenden werden diese Schwellen anstelle von  $He_{(N)}^+$  auch  $I_N$  genannt, da dies die in der Literatur übliche Schreibweise ist.

Vor diesen Messungen wurde allgemein angenommen, daß die Spektren von doppelt angeregten Zuständen von Helium keine besonders überraschenden Eigenschaften aufweisen sollten. Es galt als sicher, daß solche Zustände im Rahmen von unabhängigen Einteilchenzuständen beschrieben werden können, d.h. mit Hilfe der Hartree-Fock-Methode, mit der Spektren von Atomen sehr erfolgreich berechnet werden konnten. Dieser Glaube war gut begründet, da die Beschreibung von Atomen mit mehreren Elektronen durch Einteilchen-Konfigurationen gut funktionierte. Das Periodensystem der Elemente und die damit verbundenen Auffüllregeln der Elektronenschalen basieren darauf.

Die Ergebnisse von Madden und Codling widerlegten jedoch diese Annahmen für die doppelt angeregten Zustände von Helium. Helium weicht so besonders stark vom Modell der Einteilchenzustände ab, weil sich beide Elektronen in einem fast reinen  $1/r$ -Potential befinden und die Einteilchenzustände dadurch stark entartet sind, wodurch sie sich mischen. Hinzu kommt die Tatsache, daß die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen nicht wie sonst üblich in Form einer kleinen Störung berücksichtigt werden kann, da das Feld des jeweiligen Partnerelektrons gleich stark ist wie das des Kerns. In Atomen mit vielen Elektronen gibt es dagegen einen inneren „Kern“ von abgesättigten Elektronenschalen. In diesen Fällen liegt kein reines  $1/r$ -Potential mehr vor. Dadurch wird die Entartung der Einteilchenzustände aufgehoben, und das Modell von unabhängigen Elektronen, auf die nur das zeitlich gemittelte Gesamtpotential wirkt, gewinnt an Gültigkeit. In diesen Fällen kann die Wechselwirkung zwischen den Elektronen in Form einer Störung des Kernpotentials behandelt werden.

---

<sup>3</sup>Das Fano-Profil wird in Abschnitt 2.1.3 auf Seite 11 besprochen.

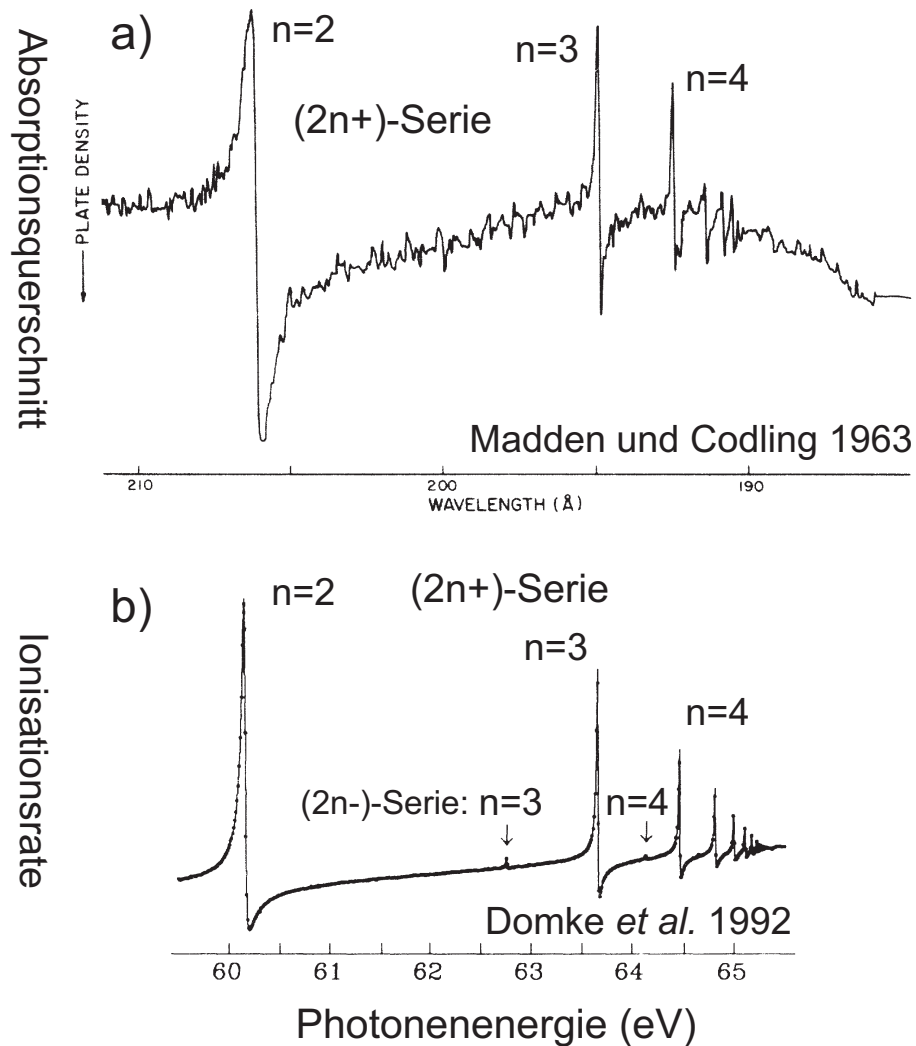


Abbildung 2.2: **a)** Absorptionsspektrum von Synchrotronstrahlung in Abhängigkeit von der Wellenlänge 1963 gemessen von Madden und Codling [8]. Nur die  $(2n+)$ -Serie ist sichtbar. Ein Jahr später wurde auch die  $(2n-)$ -Serie nachgewiesen [9]. **b)** Gegenüberstellung einer modernen Messung von Domke *et al.* von 1992 [43]. Hier ist auch die  $(2n-)$ -Serie sichtbar. Die Resonanzen weisen die typische Form von Fano-Profilen auf, die durch Interferenzen zwischen verschiedenen Reaktionskanälen erklärt werden können (siehe Abschnitt 2.1.3 auf Seite 11). Anhand der  $n = 4$ -Resonanz der  $(2n-)$ -Serie in Bild b wurde in dieser Arbeit die Photonenenergieauflösung bestimmt (Siehe Abschnitt 5.3.7 auf Seite 65).

### 2.1.1 Die $(2n+)$ - und die $(2n-)$ -Serie

Zeitgleich zur Veröffentlichung der Messungen von Madden und Codling wurden diese Ergebnisse bereits von Cooper, Fano und Prats [13] diskutiert. Zur Interpretation der Ergebnisse wurden zwei Serien von autoionisierenden Zuständen betrachtet, die  $2snp$  und  $2pns$  genannt wurden, d.h. dieser Nomenklatur lagen Einteilchenzustände zugrunde. Das lag nahe, da durch die Absorption nur eines Photons aus dem Grundzustand heraus nur  $^1P^u$ -Zustände, d.h. Zustände mit dem Gesamtdrehimpuls 1 bevölkert werden können.

Die Autoren in [13] argumentieren, daß die Zustände  $2snp$  und  $2pns$  nahezu entartet sind, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zwischen diesen Zuständen jedoch groß ist<sup>4</sup>. Aufgrund der starken Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird daher die Entartung der dicht beieinanderliegenden Zustände zu neuen Wellenfunktionen führen:

$$\psi(2n\pm) = \frac{\psi(2snp) \pm \psi(2pns)}{\sqrt{2}} \quad (2.2)$$

Bei geeigneter Normierung<sup>5</sup> der beiden Wellenfunktionen kann das  $\pm$ -Zeichen physikalisch interpretiert werden:

1. Die beobachteten Resonanzen in Abbildung 2.2 gehören der  $(+)$ -Serie an. Die Resonanzen der  $(-)$ -Serie<sup>6</sup> sind sehr klein, da ihre Anregung aus dem Grundzustand heraus sehr unwahrscheinlich ist (siehe folgende Argumentation).
2.  $(+)$ -Resonanzen liegen energetisch etwas höher als  $(-)$ -Resonanzen.

Die Autoren argumentieren, daß die Wellenfunktionen  $\psi(2snp)$  und  $\psi(2pns)$  in der Nähe des Kerns nahezu identisch sind und daher  $\psi(2n-)$  in diesem Bereich verschwindet. Das ist aber gerade der Überlappbereich mit dem  $1S^2$ -Zustand, in dem das Dipolmoment des Photons die Anregung vermittelt. Daraus folgt Punkt 1. Anhand einiger Rechnungen wird weiter argumentiert, daß die radiale Bewegung der Elektronen im Teilchenbild in den  $(+)$ -Zuständen synchron und periodisch verläuft, d.h. daß sich beide Elektronen entweder in der Nähe des Kerns befinden oder beide davon entfernt sind. Bei  $(-)$ -Zuständen dagegen verläuft diese Bewegung verschoben: Ist ein Elektron dem Kern nahe, so ist das andere davon entfernt. Der Überlapp zwischen diesem Zustand und dem Grundzustand in Kernnähe ist daher geringer und eine Anregung durch Photonenabsorption unwahrscheinlicher. Dieser Punkt ist logisch verknüpft mit der vorhergehenden Argumentation der verschwindenden  $(-)$ -Wellenfunktion in Kernnähe. Da sich die Elektronen im Fall der  $(-)$ -Zustände nie sehr nahe kommen, wirkt auf sie im zeitlichen Mittel ein weniger abgeschwächtes Kernpotential als bei  $(+)$ -Zuständen. Daraus folgt Punkt 2.

---

<sup>4</sup>Beispielsweise ergibt eine Rechnung mit abgeschirmten wasserstoffartigen Wellenfunktionen für die Zustände  $2s3p$  und  $2p3s$  einen starken Wechselwirkungsüberlapp von ca. 1 eV, wohingegen die Zustände mit  $E_{2snp} - E_{2pns}$  nahezu entartet sind.

<sup>5</sup>Real und positiv wenn beide Elektronen nah am Kern sind.

<sup>6</sup>1964 nachgewiesen von Madden und Codling [9].

### 2.1.2 Die dritte Serie ( $2pnd$ )

In den Überlegungen von Cooper, Fano und Prats fehlte eine Gruppe von Resonanzen - die ( $2pnd$ )-Serie. Sie wurde 1964 von Burke *et al.* [29, 30] im Rahmen von ersten numerischen Rechnungen<sup>7</sup> zu diesem Thema vorhergesagt. Sie ist ca. 30-fach schwächer als die ( $2n-$ )-Serie. Zudem liegen die Mitglieder dieser beiden Serien sehr dicht beieinander (Abb. 2.3).

Aus diesen Gründen heraus wurde sie erst 1992 experimentell nachgewiesen [43], als die Technik so weit fortgeschritten war, daß die notwendige Photonenenergieauflösung zur Verfügung stand. Die Zustände der ( $2pnd$ )-Serie liegen nicht rein vor [14]. Sie mischen sich mit den ( $2n-$ )-Zuständen - ähnlich wie es  $2snp$  und  $2pns$  miteinander tun. Dies wurde von Cooper *et al.* [13] nicht berücksichtigt.

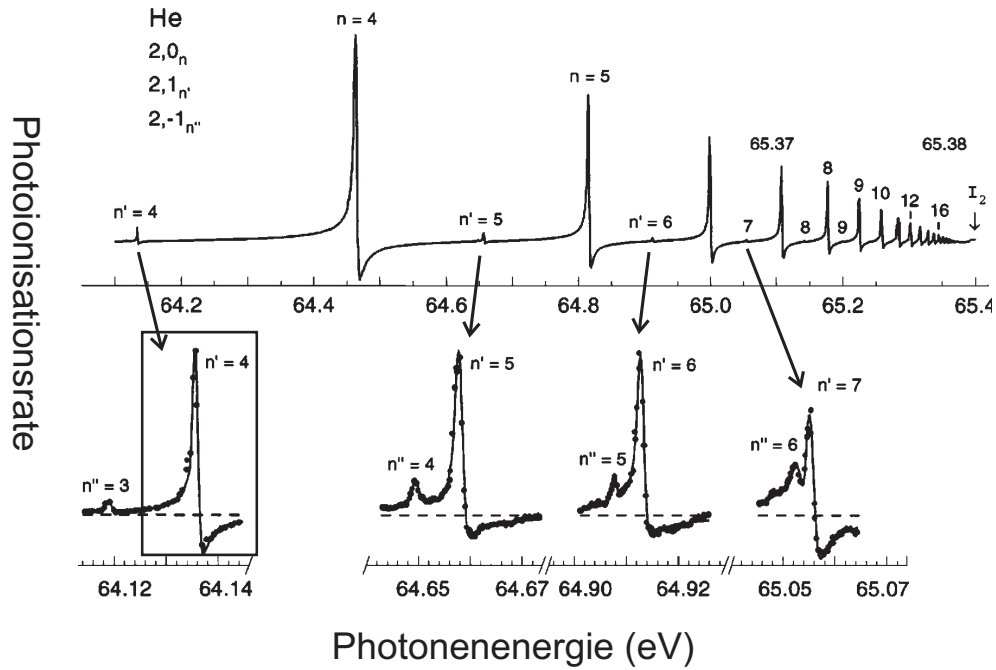


Abbildung 2.3: Totaler Wirkungsquerschnitt der  $He^+$ -Produktion [45]. Dargestellt sind drei Resonanz-Serien unterhalb von  $I_2$ , d.h. in einer Region unterhalb des ersten angeregten Zustandes  $He^+_{(N=2)}$ . Die stärkste Serie ist die  $2,0_n$ -Serie. Die beiden anderen Serien werden  $2,1'_n$  bzw.  $2,-1''_n$  genannt. Es wird hier die Klassifikation von Zubek *et al.* [51] verwendet, die eine abgekürzte Form des  $N(K,T)_n^A$ -Schemas von Herrick und Sinanoğlu [15] und Lin [24] ist. In der alten Nomenklatur sind es die Serien ( $2n+$ ), ( $2n-$ ) und ( $2pnd$ ). Die verschiedenen Bezeichnungen werden in den folgenden Abschnitten erklärt. Mit Hilfe der eingrahmten Resonanz wurde die Photonenenergieauflösung bestimmt (Abschnitt 5.3.7 auf Seite 65).

<sup>7</sup>Close-Coupling-Methode. Siehe Abschnitt 2.3.1 auf Seite 17.

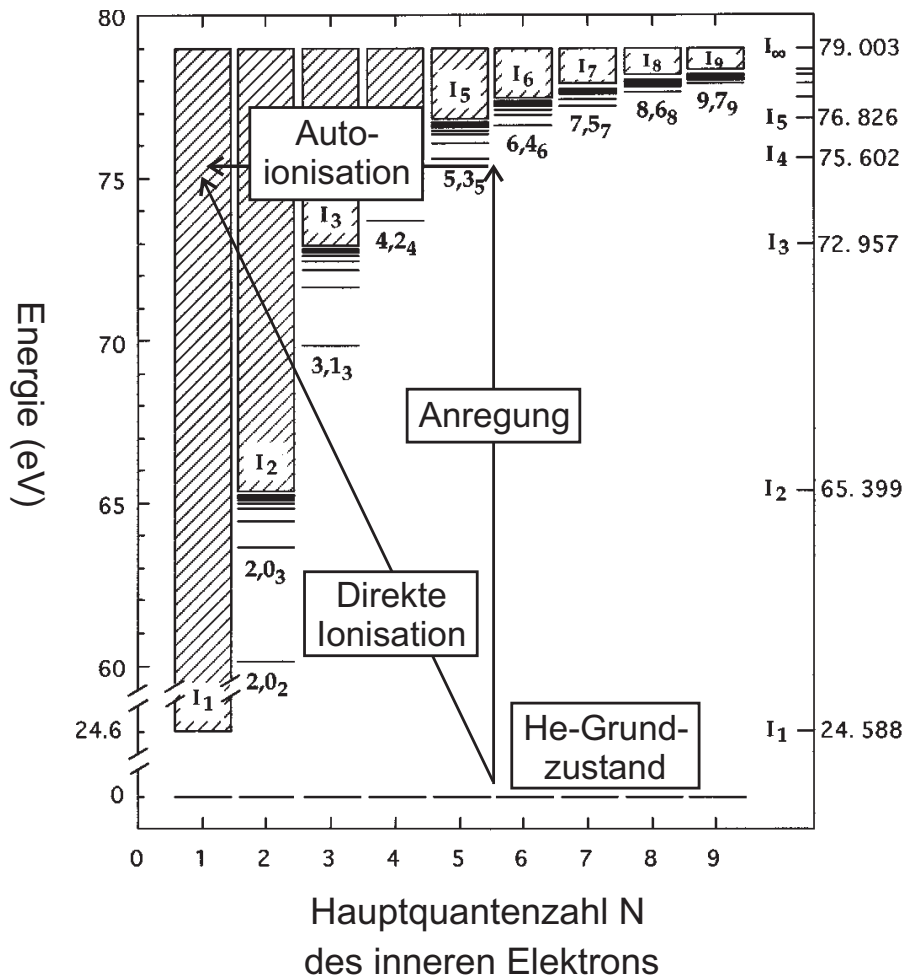


Abbildung 2.4: Illustration der beiden interferierenden Ionisationswege. Die Ionisation kann direkt in einen der energetisch möglichen Kontinuumszustände erfolgen oder über den Zwischenschritt der Anregung eines autoionisierenden doppelt angeregten Zustandes. In diesem Beispiel ist die Emission ins Kontinuum des  $He_{(N=1)}^+$ -Endzustandes ( $I_1$ ) dargestellt. In dem Bild ist für jede Kontinuumschwelle  $I_N$  nur die jeweils stärkste Serie eingetragen. In Wirklichkeit sind es  $2N-1$  Serien, die jeweils zur gleichen Schwelle  $I_N$  hin konvergieren. Die Abbildung ist aus Domke *et al.* [44] entnommen.

### 2.1.3 Das Fano-Profil

Autoionisierende Zustände zeichnen sich im Ionisationsspektrum durch eine charakteristische Form aus [16, 17]. Sie wird verursacht durch Interferenzeffekte zwischen einem gebundenen (instabilen) Zustand und einem oder mehreren Kontinuumszuständen<sup>8</sup> der gleichen Energie, d.h. wenn die Ionisation auf zwei Wegen erfolgen kann, die nach der Reaktion nicht mehr unterschieden werden können. Ein Weg ist dabei die direkte Ionisation, der andere besteht in der Anregung eines autoionisierenden Zustandes, der nach kurzer Zeit unter Aussendung eines Elektrons zerfällt (Abb. 2.4, Seite 10).

Im einfachsten Bild wird der gemischte Zustand  $\psi$  beschrieben durch eine Linearkombination eines gebundenen Zustandes und den Kontinuumszuständen  $\psi(E)$ .  $E$  ist der kontinuierliche Index (Photonenenergie) der Kontinuumszustände.

$$\psi = c_1 \psi(2n+) + c_2 \psi(E) \quad (2.3)$$

Die Absorptionswahrscheinlichkeit vom Grundzustand  $\psi_g$  aus ist proportional zum Quadrat des Matrixelementes  $M_{gE}$ .

$$M_{gE} = \int \psi_g^* \mathbf{r} (c_1 \psi(2n+) + c_2 \psi(E)) dV \quad (2.4)$$

Dieser Ausdruck enthält Interferenzterme, die von den Energiedifferenzen  $E_{Kont.} - E(2n+)$  abhängen. Die charakteristische Form solcher Resonanzen ist 1961 von Fano theoretisch behandelt worden.<sup>9</sup> Fano gibt eine Gleichung an, mit der die verschiedenen Formen aller Resonanzen durch einen Satz von fünf Parametern beschrieben werden können.

$$\sigma(E) = \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} + \sigma_b \quad \text{mit} \quad \varepsilon = \frac{E - E_R}{2\Gamma} \quad (2.5)$$

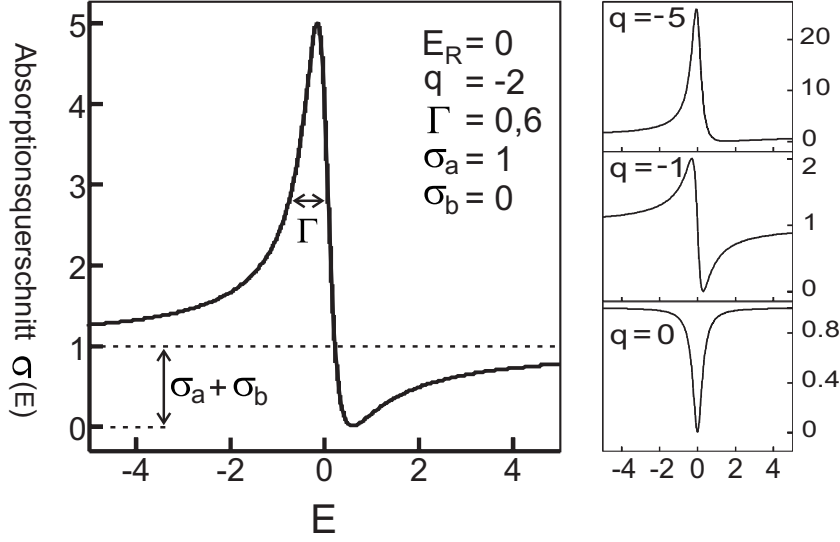
Dabei ist  $\Gamma$  die Breite der Resonanz und  $E_R$  ihre Position im Spektrum (nicht des Maximums).  $\sigma_a$  und  $\sigma_b$  ist jeweils der Absorptionsquerschnitt für die ungestörte Anregung des doppelt angeregten Zustandes bzw. für die Anregung in das Kontinuum.  $q$  bestimmt die Asymmetrie oder in anderen Worten die Form der Resonanz.

In Abbildung 2.5 sind Kurven mit verschiedenen Werten für  $q$  dargestellt.  $q^2$  ist das Verhältnis zwischen den Anregungswahrscheinlichkeiten in einen diskreten Zustand und einen Kontinuumszustand. Für  $q \rightarrow \pm\infty$  ist die Anregung eines diskreten Zustandes dominant und für  $q \rightarrow 0$  ist ein direkter Übergang ins Kontinuum wahrscheinlicher.

---

<sup>8</sup>Beim Zerfall von hoch angeregten autoionisierenden Zuständen gibt es mehrere Kontinua, in die der Zerfall erfolgen kann. Sie gehören jeweils zu einem der energetisch möglichen Endzustände  $He_{(N)}^+$  (Abb. 2.4, Seite 10).

<sup>9</sup>Die Grundgedanken dazu existieren jedoch bereits seit den 30er Jahren [18, 12].



Abbildungung 2.5: Darstellung der Fano-Funktion (Gl. 2.5) für verschiedene Form-Parameter  $q$ . Eine Vorzeichenänderung von  $q$  bewirkt eine links/rechts-Spiegelung der Kurve an der Position  $E_R$ .  $E_R$  ist die Position der Resonanz. Sie ist bestimmt durch den Ort, an dem die Kurve den Wert  $\sigma_a + \sigma_b$  annimmt. In der hier gewählten Darstellung hat  $\sigma_b$  den unphysikalischen Wert  $\sigma_b = 0$ . Die Breite  $\Gamma$  steht über  $\Gamma = 1/\tau$  mit der Lebensdauer  $\tau$  des autoionisierenden Zustandes in Beziehung.

Die Herleitung von Gl. 2.5 ist langwierig und vermittelt keine Einsichten, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit wichtig sind. Daher wird an dieser Stelle auf die ursprünglichen Arbeiten [16, 17] verwiesen.

Innerhalb einer Serie ist  $q$  nahezu konstant [17] und die Breiten  $\Gamma$  und Intensitäten der  $i$ -ten Resonanz skalieren mit  $(i-\delta)^{-3}$ , wobei mit dem Parameter  $\delta$  der Abschirmung des Kernpotentials durch das innere Elektron - dem Quantendefekt - Rechnung getragen wird.

Der Wert von Gleichung 2.5 ist beträchtlich, da mit ihrer Hilfe die Formen der Resonanzen mit wenigen Parametern quantitativ beschrieben werden können. Dadurch werden die Breite der Resonanzen  $\Gamma$  und ihre Positionen  $E_R$  trotz unterschiedlicher Formen einheitlich definiert.

#### 2.1.4 Überlappende Serien oberhalb von $N \geq 5$

Bis  $N=5$  sind die Serien getrennt. Innerhalb der Serie, die zur  $I_5$ -Schwelle hin konvergiert, d.h. im Bereich unterhalb der  $He_{(N=5)}^+$ -Schwelle, taucht das unterste Mitglied der nächst höhergelegenen Serie auf, die zu  $I_6$  hin konvergiert. Das ist bereits im Serienschema in Abb. 2.4 (Seite 10) sichtbar. In Abbildung 2.6 sind Daten aus [44] aufgetragen. Zu sehen sind die beiden Serien  $5, 3_n$  und  $6, 4_n$ . Hier wird die moderne Klassifizierung  $N, K_n$  der Resonanzen benutzt. Sie ist im folgenden Abschnitt 2.2 be-



schrieben.  $N$  steht dabei für die Hauptquantenzahl des inneren Elektrons und  $n$  für die des äußeren. Die Quantenzahl  $K$  beschreibt die Winkelkorrelation zwischen den Elektronen. Die Serien mit  $K = N - 2$  sind jeweils am stärksten.

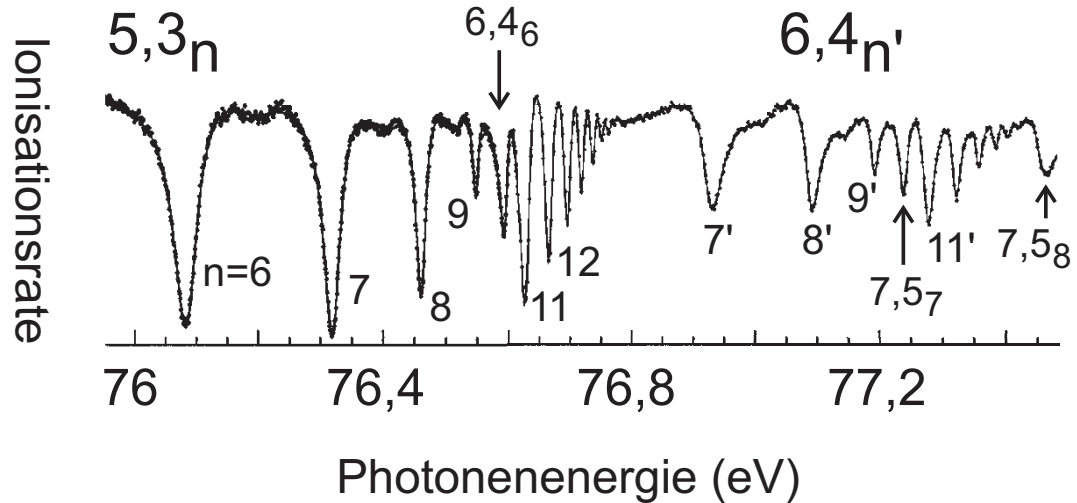


Abbildung 2.6: In der Abbildung sind die beiden Serien  $5,3_n$  und  $6,4_n$  sichtbar. Die Nomenklatur ist im folgenden Abschnitt 2.2 beschrieben. Das erste Mitglied der nächsthöheren Serie taucht schon innerhalb der darunterliegenden auf und beeinflusst die in der Nähe liegenden Resonanzen. Die Abbildung wurde entnommen aus [44] (Domke *et al.*).

Die Serie  $5,3_n$  in Abbildung 2.6 konvergiert gegen den Endzustand  $He_{(N=5)}^+$  bzw. in der in der Literatur üblichen Schreibweise gegen  $I_5$ . Die Serie  $6,4_n$  konvergiert gegen  $I_6$ . Die zweitstärksten Serien  $5,1_n$  und  $6,2_n$  sind hier kaum sichtbar.

Innerhalb der beiden Serien taucht bereits die unterste Resonanz der jeweils darüberliegenden Serie auf. Die Resonanz  $6,4_6$  liegt dort, wo eigentlich  $5,3_{10}$  angesiedelt ist und  $7,5_7$  befindet sich dort, wo  $6,4_{10}$  liegt. Das hat mehrere interessante Effekte zur Folge. Zum einen werden die Störresonanzen nicht direkt sichtbar. Wäre das der Fall, so könnten beispielsweise die Resonanzen  $5,3_9$  bis  $5,3_{11}$  nicht so gut getrennt werden, wie es in der Abbildung der Fall ist, denn ein Vergleich mit  $6,5_7$  ergibt, daß die  $6,4_6$ -Resonanz mindestens so breit sein sollte wie  $5,3_9$  bis  $5,3_{11}$  zusammengekommen. Oberhalb der Schwelle von  $He_{(N=8)}^+$ , d.h.  $I_8$ , ist der Überlapp zwischen einzelnen Serien so stark, daß keine klare Serienstruktur mehr zu erkennen ist (siehe Abb. 2.7 auf Seite 14).

## 2.2 Die neuen Quantenzahlen $(K, T)^A$

Die alte Nomenklatur der Resonanzen war nur geeignet für die ersten Serien unterhalb von  $I_2$ , die von Madden und Codling gefunden wurden. Das Übertragen dieser Schreibweise auf höherliegende Serien wurde zunehmend schwieriger.

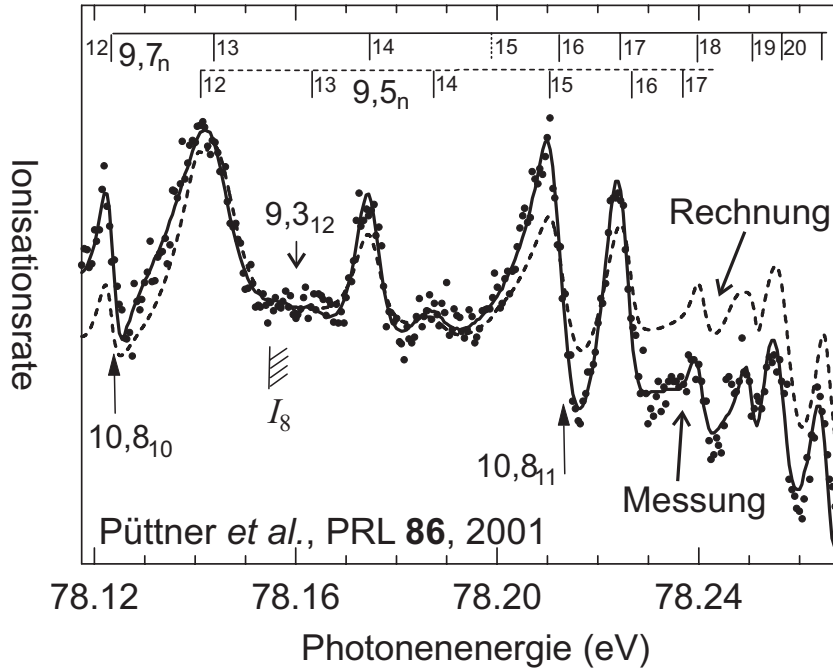


Abbildung 2.7: Die Ionisationsrate oberhalb der  $He_{(N=8)}^+$ -Schwelle ( $I_8$ ). Experimentelle Daten (Punkte mit durchgezogener Kurve) und theoretische Rechnungen (Complex-Rotation-Methode (Abschnitt 2.3.3), gestrichelte Linie) sind zum Vergleich dargestellt. Die theoretischen Positionen von Resonanzen aus drei  $I_9$ -Serien sind eingetragen. Zusätzlich sind die Positionen von zwei Resonanzen aus der  $10, 8_n$ -Serie, die mit den  $I_9$ -Serien interferieren, eingezeichnet. In dieser Energieregion ist der Überlapp zwischen den Serien so stark, daß die einzelnen Resonanzen nicht mehr getrennt identifiziert werden können.

Neue theoretische Methoden führten zusätzlich zu den bisherigen Hauptquantenzahlen  $N$  und  $n$  des inneren bzw. des äußeren Elektrons zu drei neuen Quantenzahlen  $N(K, T)_n^A$ . Die verschiedenen Modelle werden weiter unten diskutiert. Den neuen Quantenzahlen können keine direkten physikalischen Bedeutungen gegeben werden, die in Einteilchenorbitalen verstanden werden können. Sie lassen sich aber grundsätzlich unterscheiden nach der Art der Korrelation, für die sie stehen.

Die Quantenzahl  $A$  klassifiziert radiale Korrelationen. Sie ist eine Verallgemeinerung der oben beschriebenen  $\pm$ -Klassifizierung von Cooper und Fano [13]: In Zuständen mit  $A = +1$  bewegen sich beide Elektronen gleichzeitig zum Kern hin oder von ihm fort. Im Fall von  $A = -1$  bewegt sich eines zum Kern hin, während sich das andere vom Kern entfernt.  $A = 0$  bezeichnet solche Fälle, in denen es keine klare radiale Korrelation zwischen den Elektronen gibt - so zum Beispiel der Fall, wenn sich ein Elektron im zeitlichen Mittel weit entfernt vom Kern befindet, während sich das andere Elektron eher in Kernnähe aufhält.  $K$  und  $T$  werden mit Korrelationen der Winkelbewegungen der beiden Elektronen in Verbindung gebracht.  $K$ ,  $T$ , und  $A$  können die folgenden Werte annehmen:

$$K = N - 1 - T, N - 3 - T, \dots, -(N - 1 - T) \quad (2.6)$$

$$T = 0, 1 \quad (2.7)$$

$$A = +1, -1, 0 \quad (2.8)$$

Nach [22] kann im Fall von  $n \approx N$  für die Interpretation von  $K$  und  $T$  eine Analogie zu einem linearen dreiatomigen Molekül gezogen werden, wobei die beiden Elektronen die äußeren Atome und der Kern des Heliumatoms das mittlere Atom darstellen. In diesem Bild gibt es die Biegungsvibrationsquantenzahl  $\nu = (N - K - T - 1)/2$ .

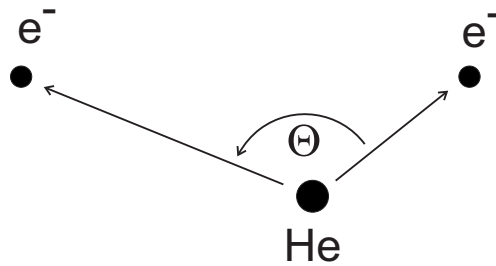


Abbildung 2.8:

Für den Fall  $n \gg N$  dagegen kann eine anschauliche Interpretation [6] über den Winkel  $\Theta$  zwischen den Elektronen erfolgen (Abb. 2.8). Dabei ist der Erwartungswert des Zwischenwinkels angenähert durch  $\langle \cos(\Theta) \rangle \approx -K/N$ .

Die am stärksten auftretenden Serien besitzen in der Regel die Quantenzahlen  $T = 1$  und  $A = +1$ . Zubek *et al.* [51] führten die abgekürzte Schreibweise  $N, K_n$  ein. Sie kann auf solche Zustände ( $^1P^u$ ) angewendet werden, die aus dem  $^1S^g$ -Grundzustand durch einen Dipolübergang, d.h. durch Absorption eines Photons, angeregt wurden.  $T$  und  $A$  werden hier nicht mehr angegeben, da sie für die eindeutige Benennung der Resonanzen in diesem Fall nicht notwendig sind; sie ergeben sich aufgrund der Auswahlregeln für Dipolübergänge aus den anderen Quantenzahlen [7]. Nach [15] sollten jeweils die  $N, K_n$ -Serien mit  $K = N - 2$  am stärksten sein. Dies stimmt mit experimentellen Befunden überein (siehe Abb. 2.3).

In Anbetracht der Tatsache, daß das klassisch betrachtete Heliumatom instabil ist und sein Phasenraum kaum geordnete Strukturen aufweist, ist die Existenz dieser fünf Quantenzahlen höchst erstaunlich. Historisch gesehen gibt es drei verschiedene theoretische Konzepte, aus denen heraus sie abgeleitet werden können.

### Der gruppentheoretische Ansatz von Herrick *et al.*

Herrick *et al.* schränkten ihre Überlegungen ursprünglich auf besonders asymmetrisch angeregte Zustände ein, für die  $n \gg N$  gilt, d.h. wenn ein Elektron im Mittel sehr viel weiter vom Kern entfernt ist als das andere. Es zeigte sich jedoch, daß die Ergebnisse dieser Untersuchung auch für Zustände mit  $n \sim N$  gültig sind.

Für ein Teilchen, das sich in einem reinen  $1/r$ -Potential bewegt, existiert neben dem Drehimpuls  $\vec{l}$  eine weitere Konstante der Bewegung. Der Runge-Lenz-Vektor

$$\vec{a} = \frac{1}{2\mu}(\vec{l} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{l}) + \frac{Ze^2}{r}\vec{r} \quad \text{mit red. Masse } \mu \quad (2.9)$$

zeigt vom gemeinsamen Massenzentrum zum Perihel der Umlaufbahn. Gl. 2.9 ist bereits symmetrisiert, so daß der entsprechende Operator  $\hat{a}$  hermitesch wird.

Für gebundene Zustände mit Bindungsenergie  $E$  entsprechen die Kommutatorbeziehungen der sechs Komponenten der Operatoren  $\hat{l}$  und  $\hat{a}' = \hat{a}\sqrt{\mu/(2E)}$  den Eigenschaften der Gruppe  $SO(4)$ . Herrick *et al.* [15] benutzen für Helium die Operatoren  $\hat{L} = \hat{l}_1 + \hat{l}_2$  und  $\hat{A}' = \hat{a}'_1 - \hat{a}'_2$ , um eine  $SO(4)$ -Algebra zu generieren. Daraus wurde eine Vorschrift abgeleitet, wie die herkömmlichen Zweiteilchenzustände  $|Nl, nl'; {}^{2S+1}L^\pi\rangle$  kombiniert werden müssen, um eine geeignete Basis<sup>10</sup> für doppelt angeregte Zustände zu erzeugen.

In diesem Zusammenhang tauchen auch erstmals die Quantenzahlen  $K$  und  $T$  auf. Bei der Beschreibung der doppelt angeregten Zustände durch die so konstruierte Basis blieben jedoch einige Probleme bestehen und darauf basierende Rechnungen waren ungenau.

## Die hypersphärische Näherung

Der Helium-Hamiltonoperator<sup>11</sup>  $\hat{H}$  beinhaltet die sechs Raumkomponenten der Ortsvektoren der beiden Elektronen. Unter der Annahme, daß sich der Hyperradius  $\mathcal{R} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$  nur langsam (adiabatisch) ändert, kann  $\hat{H}$  so umgeschrieben werden, daß  $\mathcal{R}$  nur noch als Parameter vorkommt und sich das Problem auf fünf Koordinaten verringert. Die fünf Koordinaten bestehen aus dem sogenannten Hyperwinkel  $\alpha = \tan(|r_2|/|r_1|)$  und vier geometrischen Winkeln, die die Ausrichtung der Vektoren  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  im Raum beschreiben. Numerische Rechnungen ergeben dann Wellenfunktionen  $\Psi_{L,M}^{S,\pi}$  und dazugehörige Potentialkurven  $E(\mathcal{R})$ .

Lin [23, 24] hat Potentialkurven qualitativ verglichen und auch Ähnlichkeiten der Ladungsdichteverteilungen zwischen verschiedenen Wellenfunktionen gefunden. Daraus ergab sich ein Schema, das mit den Quantenzahlen  $K$  und  $T$  - die schon von Herrick *et al.* gefunden worden waren - und der neuen Quantenzahl  $A$  geordnet werden konnte. Lins Klassifikation wird noch heute unverändert angewendet.

## Die molekular-adiabatische Näherung

Feagin und Briggs [25, 26] schlugen vor, das Heliumatom als  $H_2^+$ -Molekül zu betrachten, wobei die Rollen der Kerne und der Elektronen vertauscht werden. Bei dieser

<sup>10</sup>Diese Basis wurde abgekürzt durch DESB für „Doubly-excited symmetry basis“.

<sup>11</sup>mit der Vereinfachung einer unendlichen Kernmasse

Methode wird der Hamiltonoperator in Jakobikoordinaten ausgedrückt. D.h. aus den beiden Ortsvektoren  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  der beiden Elektronen werden neue Koordinaten erzeugt:  $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  ist der Vektor, der beide Elektronen verbindet und  $\vec{r}$  zeigt von ihrem gemeinsamen Schwerpunkt aus zum Kern. Nun wird  $\vec{R}$  als eine adiabatische, d.h. eine sich langsam ändernde Größe, angesehen, wodurch sich das Problem von anfangs sechs Koordinaten auf die drei Komponenten von  $\vec{r}$  reduziert. Dieser Schritt ist zunächst nicht naheliegend, da sich ja gerade die Elektronen (und damit  $\vec{R}$ ) sehr schnell bewegen. Wie bei der Behandlung von  $H_2^+$ -ähnlichen Molekülen üblich, werden die Wellenfunktionen über Produkte von Molekülorbitalen, Rotations- und Vibrationszuständen konstruiert.

Diese Beschreibung des Heliumatoms führt ebenfalls zu Quantenzahlen, die sich durch die weiter oben eingeführten Quantenzahlen  $K$ ,  $T$  und  $A$  ausdrücken lassen.

## 2.3 Numerische Berechnungsverfahren

*„Es ist schön, daß der Computer das Problem versteht.  
Aber ich möchte es auch verstehen.“*

*Eugen Wigner*

Die Schrödingergleichung eines quantenmechanischen Systems kann nur in seltenen Fällen analytisch gelöst werden. In den meisten Fällen müssen Vereinfachungen des Problems vorgenommen werden und selbst dann sind oft nur numerische Lösungen möglich. In den 30er, 40er und 50er Jahren des letzten Jahrhunderts wurden einige Methoden entwickelt, die auch heute noch die Grundlage von modernen Lösungsverfahren bilden. Im Laufe der Zeit wurden sie weiterentwickelt und auf spezielle Problemstellungen angepaßt.

Nach über 50 Jahren Entwicklung sind die heutzutage angewandten Methoden so spezialisiert und aufgefüchert, daß es schwer fällt, die ursprünglichen Grundlagen zu erkennen. Eine detaillierte Beschreibung dieser Verfahren und ihrer Anwendung auf die Photoionisation von Helium würde daher den Rahmen dieser Arbeit übersteigen. In den folgenden Abschnitten sollen trotzdem die Grundgedanken der wichtigsten Methoden skizziert werden, ohne jedoch dabei auf ihre spezielle Anwendung auf das Heliumproblem einzugehen.

### 2.3.1 Close-Coupling-Rechnungen

Ursprünglich wurde diese Methode für die Streuung langsamer Elektronen an Wasserstoffatomen entwickelt [27, 28]. An diesem Beispiel orientiert sich auch die folgende Beschreibung.

Begonnen wird mit der Konstruktion des Hamiltonoperators  $\hat{H}$ , der sich aus dem

Hamiltonoperator des Targetatoms  $\hat{H}_H$  und zusätzlichen Termen  $\hat{H}_{e-}$ , die sich aus der Berücksichtigung des gestreuten Elektrons ergeben, zusammensetzt.

$$\left( \hat{H}_H + \hat{H}_{e-} + E \right) \Psi = \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 + \frac{e^2}{|\vec{r}_1|} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 + \frac{e^2}{|\vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + E \right) \Psi = 0 \quad (2.10)$$

wobei der Index 2 das gestreute Elektron bezeichnet.

Das Problem wird in zwei Bereiche geteilt: Ein Elektron wird sozusagen nur als externer Parameter betrachtet und das restliche System wird isoliert davon behandelt<sup>12</sup>.

Da das auftreffende - oder im Fall von Ionisation ausgehende - Elektron als ebene Welle behandelt werden kann, setzt sich die Gesamtenergie  $E$  zusammen aus

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_0^2$$

mit der Grundzustandsenergie  $E_0$  des Wasserstoffatoms und der Wellenzahl  $k_0$  des eintreffenden Elektrons. Der Lösungsansatz besteht darin, die Wellenfunktion  $\Psi$  in einer Basis von Wasserstoffeigenfunktionen<sup>13</sup>  $\psi_n$  zu entwickeln. Dabei steht der Index  $n$  symbolisch für die Quantenzahlen aller möglichen Eigenfunktionen. Mit  $n=0$  ist der Grundzustand gemeint.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{A} \sum_n \int \psi_n(\vec{r}_1) F_n(\vec{r}_2) \quad (2.11)$$

Das Integralzeichen soll die Möglichkeit andeuten, zusätzlich auch kontinuierliche Zustände zu verwenden. Der Symmetrisierungsoperator  $\mathcal{A}$  an dieser Stelle soll auf die explizite Berücksichtigung der Ununterscheidbarkeit der Elektronen hinweisen. Zum Zweck einer einfachen Darstellung soll sie jedoch im folgenden nicht weiter berücksichtigt werden.

Einsetzen von Gl. 2.11 in 2.10 ergibt zusammen mit der Tatsache, daß  $\psi_n$  Eigenfunktionen von  $\hat{H}_H$  mit den Eigenwerten  $E_n$  sind, den Ausdruck

$$\sum_n \int \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_2^2 + k_n^2) + \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2|} \right) \psi_n(\vec{r}_1) F_n(\vec{r}_2) = 0 \quad (2.12)$$

$$\text{mit } k_n^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_n)$$

Multiplizieren von Gl. 2.12 mit  $\psi_m^*(\vec{r}_1)$  und anschließende Integration über  $\vec{r}_1$  führt zu einem System gekoppelter Differentialgleichungen für  $F_n$

$$(\nabla_2^2 + k_n^2) F_n = \sum_m \int U_{mn} F_m \quad (2.13)$$

$$\text{mit } U_{mn} = \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} \int \psi_m^* \left( \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right) \psi_n d\vec{r}_1 \quad (2.14)$$

<sup>12</sup>Im Fall der Einfachionisation von Helium wären diese beiden Teile das emittierte Elektron und das  $He^+$ -Ion.

<sup>13</sup>bzw. allgemeiner in Eigenfunktionen des Operators  $\hat{H}_H$

Bis hierhin wurde ein allgemeines Verfahren beschrieben. Es existieren nun eine ganze Reihe von Näherungen, die die Lösung dieses Gleichungssystems erleichtern. Dabei wird beispielsweise angenommen, daß alle  $U_{mn}$  mit  $m \neq n$  und  $m, n > 0$  vernachlässigt werden können<sup>14</sup>, oder anstelle der Summe in Gl. 2.11 werden nur wenige ausgewählte Funktionen benutzt. Solch eine Näherung ist die Close-Coupling-Approximation. In der Praxis ist die Berücksichtigung von Kontinuumszuständen aus numerischen Gründen sehr schwierig. Zudem stellte sich heraus, daß sie für die Qualität der Rechnungen sehr wichtig waren. Aus diesen Gründen führten Burke *et al.* [33] quasi per Hand sogenannte Pseudo-Zustände ein, die zwar diskretisiert waren, innerhalb der Rechnungen jedoch das Fehlen der Kontinuumszustände teilweise kompensierten. Im modernen Convergent-close-coupling-Verfahren [34, 35] werden so lange neue Zustände zur Basis dazugenommen, bis sich die Form von  $\Psi$  nicht mehr signifikant ändert. Close-Coupling-Rechnungen werden oft schon bei recht einfachen Problemstellungen sehr aufwendig. Hinzu kommt die Tatsache, daß das Gleichungssystem der gekoppelten Differentialgleichungen für jede Energie neu gelöst werden muß. Frühe Close-coupling-Rechnungen bezüglich der doppelt angeregten Zuständen von Helium wurden von Burke und McVicar durchgeführt [29, 30, 31, 32].

### 2.3.2 Die R-Matrix-Methode

Die R-Matrix-Methode [37, 38]<sup>15</sup> wurde ursprünglich von Wigner und Eisenbud [36] für Berechnungen im Gebiet der Kernphysik entwickelt. Sie ist jedoch so allgemein, daß sie nach kurzer Zeit auch in der theoretischen Atomphysik ein wichtiges Hilfsmittel wurde. Sie wurde 1973 von Fano *et al.* grundlegend modifiziert [39] und seither „Eigenchannel R-Matrix“-Methode (ERM) genannt. Heutzutage wird ausschließlich diese Form der R-Matrix-Rechnung angewandt.

Bei beiden Methoden wird das Reaktionsvolumen in zwei Bereiche unterteilt. Im inneren Bereich  $r < r_0$  wird das Problem möglichst exakt unter Berücksichtigung aller Wechselwirkungen behandelt. Durch die Einschränkung auf ein abgeschlossenes Volumen wird die Berechnung von Eigenfunktionen in diesem Bereich erleichtert und es treten keine Kontinuumszustände auf. Der Radius  $r_0$  muß so groß gewählt werden, daß die Wellenfunktion  $\Psi(r_1, r_2)$  für gleichzeitiges  $r_1 > r_0$  und  $r_2 > r_0$  nahezu verschwindet. In modernen Rechnung wird mit einem Radius von  $r_0=200$  a.u. gearbeitet.

Im äußeren Bereich wird nur die Wechselwirkung des emittierten Elektrons mit dem zeitlich gemittelten Potential  $V(r)$  berücksichtigt, das vom Kern und den zurückbleibenden Elektronen erzeugt wird.

Wellenfunktionen für das gesamte Problem werden nun durch Linearkombinationen von „inneren“ und „äußeren“ Eigenfunktionen gebildet. Dabei muß die so erzeugte Wellenfunktion gewissen Anschlußbedingungen auf der Oberfläche  $r = r_0$  des inneren Reaktionsvolumen genügen. Diese Anschlußbedingungen auf der Oberfläche (Werte der Wellenfunktion und ihrer Ableitung entlang der Oberflächennormalen) werden durch

---

<sup>14</sup>Die sogenannte „Distorted wave approximation“

<sup>15</sup>In [37] insbesondere Seite 1025 ff.

die R-Matrix ausgedrückt. Aus der R-Matrix können weitere Größen des Systems, wie beispielsweise die Streumatrix, abgeleitet werden.

### 2.3.3 Die Complex-Rotation-Methode

Die Methode der Complex-Rotation wurde ursprünglich von Balslev *et al.* [41] vorgeschlagen und von Doolen *et al.* auf Atome mit zwei Elektronen (zunächst  $H^-$ ) angewendet [42]. Sie zeichnet sich dadurch aus, daß mit ihrer Hilfe die Positionen und Breiten von Resonanzen im Kontinuum direkt ausgerechnet werden können - und zwar mit Techniken, die im eigentlichen Sinne nur auf diskrete, gebundene Zustände anwendbar sind. Das ist mit anderen Methoden nicht möglich - es müssen üblicherweise zunächst die Wirkungsquerschnitte  $\sigma(E_\gamma)$  berechnet werden, um Resonanzen identifizieren zu können. Die Complex-Rotation-Methode besteht im Kern aus einer einfachen Koordinatentransformation des Hamiltonoperators  $\hat{H}$ . Dabei werden die Koordinaten  $r$  und  $p$  umgeschrieben zu  $r \rightarrow re^{i\theta}$  und  $p \rightarrow pe^{-i\theta}$  [40]. Der transformierte Hamiltonoperator  $\hat{H}_\theta$  ist dadurch nicht mehr hermitesch, d.h. er besitzt reale und komplexe Eigenwerte. Die realen Eigenwerte sind gebundenen Zuständen zugeordnet. Sie sind unabhängig vom Rotationswinkel  $\theta$  und stimmen mit den Eigenwerten vom nicht rotierten Hamiltonoperator überein. Diejenigen komplexen Eigenwerte, deren Werte  $E - i\Gamma/2$  sich bei Variationen von  $\theta$  nicht ändern, geben direkt Auskunft über die Positionen ( $E$ ) und Breiten ( $\Gamma$ ) von Resonanzen im Energiespektrum. Zusätzlich dazu treten Eigenwerte auf, die kontinuierlich entlang von Linien aufgereiht sind, die mit der Achse des Realanteils einen Winkel von  $2\theta$  bilden. Die Punkte auf solchen Linien gehören zu Kontinuumszuständen des nicht rotierten  $\hat{H}$ . Die zu den Resonanzen korrespondierenden Wellenfunktionen lassen sich nun mit konventionellen Methoden numerisch berechnen, die sonst nur auf diskrete Zustände angewendet werden können. Rechnungen, die auf dieser Methode basieren, sind sehr präzise. In Abbildung 2.7 auf Seite 14 werden aktuelle Messungen und Rechnungen zum totalen Wirkungsquerschnitt verglichen.

Mit Hilfe der Complex-Rotation-Methode können keine partiellen Wirkungsquerschnitte berechnet werden.

## 2.4 Winkelverteilungen: Der $\beta$ -Parameter

Nach [19, 20, 21] lassen sich innerhalb der Dipolnäherung<sup>16</sup> alle physikalisch möglichen Formen der Elektronenemissionsverteilung der Einfachphotoionisation von nicht ausgerichteten Atomen und Molekülen durch eine einfache Zahl, den sogenannten Asymmetrie- oder auch  $\beta$ -Parameter, beschreiben.

---

<sup>16</sup> Anschaulich ausgedrückt wird von „Dipolnäherung“ gesprochen, wenn die Wellenlänge des einstrahlenden Lichts  $\lambda$  groß ist gegen den Durchmesser  $r$  des Atoms, d.h. wenn  $k \cdot r \ll 1$  a.u., wobei  $k$  die Wellenzahl des Photons ist. Bei der Reihenentwicklung des Dipoloperators können dann alle höheren Potenzen von  $k \cdot r$  vernachlässigt werden.



Im Fall von linear polarisiertem Licht wird die Richtungsabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes parametrisiert durch [60]

$$\frac{d^2\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{total}}{4\pi} \left( 1 + \beta \left[ (1 - \sin^2 \theta)(\sin^2 \phi + S_1 \cos^2 \phi) + S_1 \cos^2 \theta \right] + \frac{1}{4} \right) \quad (2.15)$$

wobei  $\theta$  der Winkel zwischen dem Polarisationsvektor der Photonen und der Emissionsrichtung des Elektrons ist.  $\phi$  ist der Winkel um die Achse des Polarisationsvektors und  $\sigma_{total}$  ist der gesamte Wirkungsquerschnitt dieses Reaktionskanals integriert über den vollen Raumwinkel  $4\pi$ . Der Wertebereich von  $\beta$  liegt zwischen  $\beta = -1$  und  $\beta = +2$ .  $S_1$  ist der Stokesparameter, der ein Maß für den Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung ist. Für vollständig linear polarisiertes Licht gilt  $S_1 = 1$ . In diesem Fall vereinfacht sich Gl. 2.15 zu

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= \frac{\sigma_{total}}{4\pi} \left( 1 + \beta P_2(\cos(\theta)) \right) \\ \text{mit } P_2(\cos(\theta)) &= \frac{3}{2} \cos^2(\theta) - \frac{1}{2} \quad (2. \text{ Leg. Polynom}) \end{aligned} \quad (2.16)$$

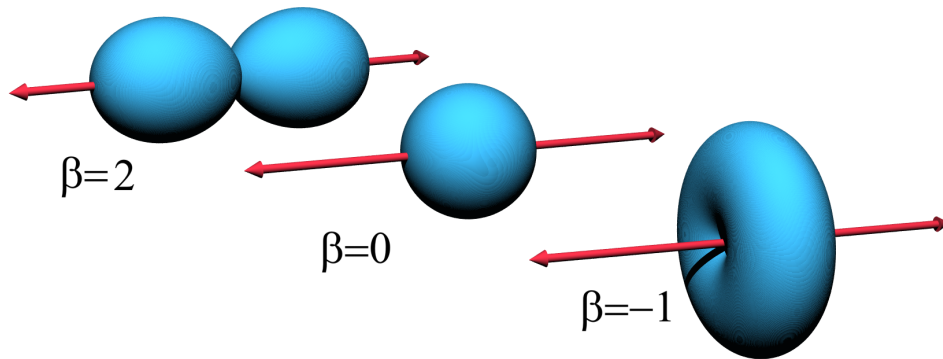


Abbildung 2.9: Der  $\beta$ -Parameter, auch Asymmetrieparameter genannt, charakterisiert die Form der Winkelverteilung (Siehe Gl. 2.16). In der Abbildung sind Verteilungen für verschiedene  $\beta$  dargestellt.  $\beta=2$  entspricht einer reinen Dipolverteilung. Die Verteilungen sind rotationssymmetrisch um den Polarisationsvektor der Photonen.

Aus Gl. 2.16 folgt, daß es einen speziellen Winkel gibt, an dem das Legendrepolynom  $P_2[\cos(\theta)]$  verschwindet.

$$\theta_{magisch} = \arccos \left( \sqrt{\frac{1}{3}} \right) = 54,736^\circ$$

Bei diesem besonderen Winkel kann daher der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{total}$  direkt gemessen werden. Da dieser Winkel für elektronenspektroskopische Messungen von besonderer Bedeutung ist, trägt er in der Literatur den Namen „Magischer Winkel“.

# Kapitel 3

## Traditionelle Meßmethoden

### 3.1 Nachweis von totalen Wirkungsquerschnitten mit Gaszellen

In den ersten Messungen von Madden und Codling [8, 9] wurde der totale Wirkungsquerschnitt für die Absorption von Licht in Helium in Abhängigkeit von der Photonenenergie gemessen. Damals wurde die Synchrotronstrahlung durch Beugung an einem Gitter spektral aufgeweitet und anschließend durch einen mit Helium gefüllten Bereich geleitet. Dieser Bereich wird Gaszelle genannt. Am Ende des Strahlweges befand sich eine Photoplatte, auf der das Spektrum der Strahlung abgebildet wurde. Nach der Messung war die Schwärzung der Photoplatte an einer gewissen Stelle ein Maß für die Durchlässigkeit des Heliumgases bei der entsprechenden Wellenlänge, d.h. es wurden Absorptionsspektren aufgenommen (siehe Abb. 2.2 a, Seite 7). Der Hochvakuumbereich des Synchrotrons wurde durch eine ca. 100 nm dicke Aluminiumschicht von der Gaszelle getrennt.

In modernen Experimenten [43, 44] wird nach wie vor eine Gaszelle eingesetzt, es wird jedoch nicht die Absorption, sondern die Ionenerzeugung gemessen. Mit dieser Methode können daher keine Zustände nachgewiesen werden, die strahlend zerfallen. Dies muß bei der Interpretation der Meßergebnisse berücksichtigt werden. Des weiteren werden nur noch Photonen mit einer sehr genau definierten Energie in die Gaszelle eingelassen. Durch ein elektrostatisches Absaugfeld werden die bei der Photoionisation frei werdenden  $He^+$ -Ionen und Elektronen zu den Elektrodenplatten hin abgesogen (siehe Abb. 3.1). Dadurch fließt ein elektrischer Strom, der mit einem empfindlichen Amperemeter gemessen wird. Der Stromfluß bei gegebener Photonenenergie ist somit die einzige Meßgröße. Differenzierte Messungen beispielsweise des Endzustandes  $N$  der erzeugten  $He^+$ -Ionen sind mit dieser Technik nicht möglich.

Die Menge der wissenschaftlichen Arbeiten, die mit dieser Methode durchgeführt wurden, ist beträchtlich [44]. Alle bisher gezeigten Spektren (Abb. 2.2, 2.3, 2.6) wurden mit dieser Technik aufgenommen. Aktuelle Ergebnisse [46] sind in Abbildung 2.7 (Seite 14) enthalten.

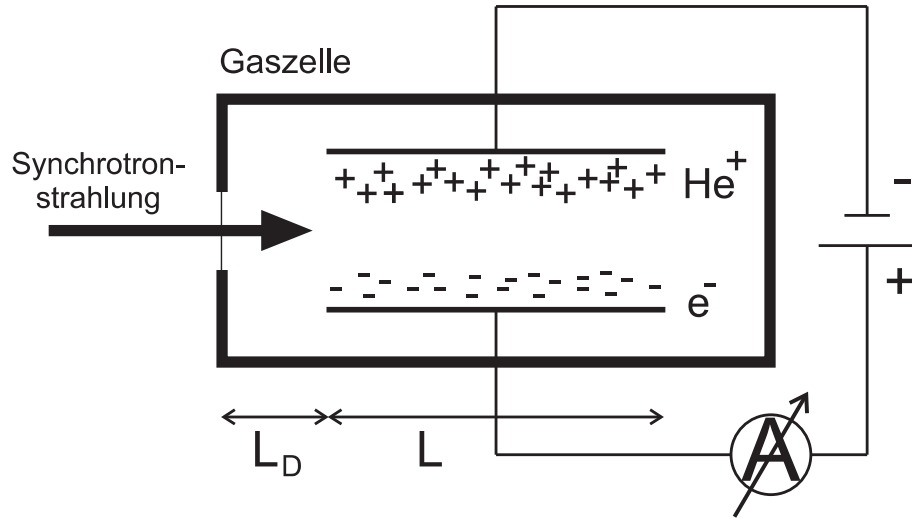


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau einer Gaszelle. In der Gaszelle befindet sich Helium mit einem Druck  $p$  zwischen 0,01 mbar und 3 mbar. Die Synchrotronstrahlung dringt durch eine dünne Fensterfolie in die Gaszelle ein. Die dort durch Photoionisation entstehenden  $He^+$ -Ionen und Elektronen werden durch ein elektrisches Feld abgesogen. Dadurch entsteht ein elektrischer Strom ( $\sim 10^{-12}$  A), der mit einem empfindlichen Amperemeter gemessen wird.  $L$  beträgt ca. 10 cm.

Die Anwendung von Gaszellenmethoden ist jedoch mit einigen technischen Problemen verbunden. Die Technik basiert auf der Messung geringster Ströme in der Größenordnung von ca.  $10^{-12}$  A. Eine exakte Messung von Strömen in diesem Bereich ist nicht trivial. Die gesuchten Resonanzen sind oft sehr klein gegenüber dem großen konstanten Untergrund der Photoionisation. Um diese kleinen Änderungen statistisch signifikant vom Untergrund trennen zu können, muß sehr lange gemessen werden.

Während der gesamten Messung muß die Teilchendichte innerhalb der Gaszelle im höchsten Maß konstant gehalten werden, da sich solche Schwankungen direkt auf die Reaktionsrate auswirken. Prinzipiell kann die Reaktionsrate und damit die nachzuweisenden Ströme gesteigert werden, indem der Gasdruck innerhalb der Zelle erhöht wird. Eine technische Grenze dafür wird durch die Stabilität des Eintrittsfensters gelegt. Es gibt jedoch noch den Effekt der Sättigung, der bei Messungen mit hohen Drücken ein Problem darstellt: Bei niedrigen Drücken ist der Strom  $I$  direkt proportional zum Druck  $p$  innerhalb der Gaszelle, d.h.  $I \sim F\sigma p$ , wobei  $F$  die Anzahl der Photonen pro Sekunde und  $\sigma$  der totale Wirkungsquerschnitt bei der gewählten Photonenenergie ist. Bei hohen Drücken jedoch tritt Sättigung ein. Im extremen Grenzfall werden alle Photonen von den Heliumatomen absorbiert, so daß auch eine Erhöhung des Drucks keine Steigerung des Stromes bewirkt, d.h. es gilt nur noch  $I \sim F$ . Da die Abschwächung des Photonenstrahls exponentiell verläuft, gilt für moderate Drücke der Ausdruck

$$I = F e^{-p\sigma L_D} (1 - e^{-p\sigma L}) \quad (3.1)$$

mit  $L_D$  für die Strecke zwischen dem Eintrittsfenster und den Elektrodenplatten und  $L$  für die Länge der Elektrodenplatten (siehe Abb. 3.1). Durch diesen Sättigungseffekt

kann die Form von Resonanzen stark verfälscht werden. Die größten Probleme dieser Methoden liegen in den langen Meßzeiten und in der Tatsache, daß Ströme und nicht einzelne Teilchen nachgewiesen werden.

## 3.2 Partielle Wirkungsquerschnitte und Winkelverteilungen

### 3.2.1 Messungen mit Flugzeitspektrometern

Lindle *et al.* [53] (1985) und Heimann *et al.* [48] (1986) haben erstmals elektronenspektroskopische Messungen an Helium durchgeführt, bei denen die Endzustände der entstandenen  $He^+$ -Ionen ermittelt wurden. Anhand der nachgewiesenen kinetischen Energien der Elektronen konnte auf den jeweiligen Zustand  $N$  des zurückgebliebenen  $He^+$ -Ions rückgeschlossen werden.

Die Methode basiert auf der Messung von Elektronenflugzeiten. In Abbildung 3.2 ist der Aufbau von Heimann *et al.* skizziert. Das Funktionsprinzip der Spektrometer von Lindle und Heimann ist sehr ähnlich. Daher wird im folgenden nur das Spektrometer von Heimann besprochen. Der Aufbau von Lindle ist in [54] beschrieben.

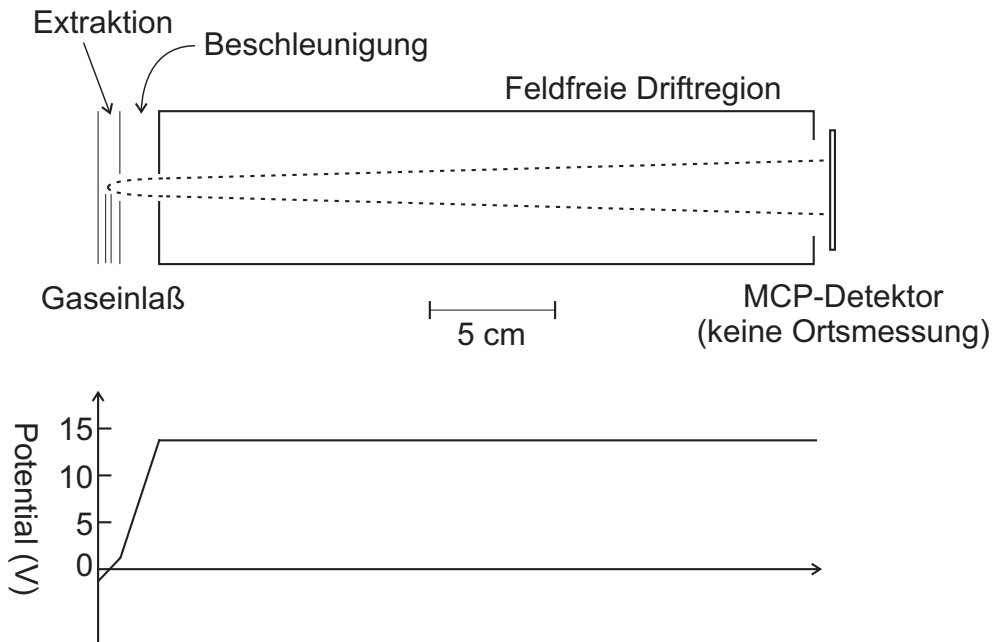


Abbildung 3.2: Der „Threshold Electron Analyzer“ von Heimann *et al.* [48]. Der Name beruht auf der hohen Nachweiseffizienz und -genauigkeit speziell für niederenergetische Elektronen ( $E_{\text{kin}} < 30 \text{ meV}$ ). Daher eignet sich diese Methode besonders für die Spektroskopie von Elektronen in den Photonenenergiebereichen unmittelbar oberhalb der  $He_{(N)}^+$ -Schwellen (engl. „Thresholds“).

Helium wird durch eine dünne Kapillare in die Vakuumkammer eingebracht, so daß es vom Photonenstrahl durchkreuzt wird. Die bei den Reaktionen frei werdenden Elektronen werden durch ein schwaches elektrostatisches Extraktionsfeld in eine Richtung gelenkt. Anschließend folgt eine weitere Beschleunigungszone mit einem stärkeren Feld. Der längste Teil der Flugstrecke befindet sich in einem feldfreien Raum, d.h. die Elektronen driften mit konstanter Geschwindigkeit auf den Detektor zu. Der Detektor mißt den Zeitpunkt, an dem das Teilchen auftrifft, nicht jedoch den Ort.

Durch die speziell gewählte Geometrie und Stärke der elektrostatischen Felder wird eine Fokussierung in Flugzeitrichtung erreicht, d.h. die Flugzeit der Elektronen ist in erster Näherung unabhängig davon, an welchem Ort innerhalb der Reaktionszone die Reaktion statt fand. Des weiteren wird die Flugzeit nicht durch die anfängliche Emissionsrichtung beeinflusst. Dadurch können den gemessenen Flugzeiten bestimmte kinetische Energien der Elektronen eindeutig zugeordnet werden.

Bei geringen kinetischen Energien ( $E_{\text{kin}} < 30 \text{ meV}$ ) können alle Elektronen unabhängig von ihrer Emissionsrichtung erfaßt werden, d.h. in diesem Bereich weist das Spektrometer eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  auf. Bei höheren Energien nimmt dieser Wert rasch ab und bereits für 0,5 eV beträgt der Akzeptanzwinkel nur noch 13 Grad, d.h. es werden nur Elektronen erfaßt, deren anfängliche Emissionsrichtung innerhalb eines  $13^\circ$ -Kegels liegt, der auf den Detektor zuweist. Dadurch ergeben sich die folgenden Einschränkungen für den Betrieb dieses Spektrometers. Die hohe Nachweiseffizienz, die mit der Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  verbunden ist, wird nur in einem 30 meV breiten Bereich unmittelbar oberhalb einer  $He_{(N)}^+$ -Schwelle erreicht. Winkelaufgelöste Messungen sind hier aber nicht möglich, da in diesem Energiebereich alle Elektronen unabhängig von ihrer Emissionsrichtung zum Detektor geleitet werden. Erst ab einer kinetischen Energie von ca. 0,5 eV kann die Winkelverteilung der Elektronenemission verlässlich gemessen werden<sup>1</sup>. Hierzu muß das Spektrometer um die Reaktionszone herum rotiert werden können, da mindestens zwei Messungen aus verschiedenen Blickwinkeln notwendig sind, um die Form der Emissionsverteilung zu ermitteln. Zwei Messungen von verschiedenen Blickwinkeln aus genügen nur deshalb, weil bereits eine Modellvorstellung in die Form der Winkelverteilung einfließt (Gl. 2.16), d.h. es wird davon ausgegangen, daß sich die Form durch den  $\beta$ -Parameter<sup>2</sup> beschreiben läßt. Partielle Wirkungsquerschnitte  $\sigma_N$  und Winkelverteilungen  $\beta_N$  wurden mit dieser Technik nur bei bestimmten Photonenenergien  $E_\gamma$  gemessen, d.h. es wurden keine kontinuierlichen Kurven  $\sigma_N(E_\gamma)$  und  $\beta_N(E_\gamma)$  aufgenommen. In diesen Einzelmessungen konnten jedoch die Endzustände  $N$  der  $He^+$ -Ionen bis  $N=10$  getrennt werden. Es zeigte sich, daß der  $\beta$ -Parameter für hohe  $N$  gegen  $\beta = -1$  zu konvergieren scheint. Dieses Verhalten wurde von Greene *et al.* [61] vorhergesagt. Dieser Punkt wird im Ergebnisteil in Abschnitt 7.2 genauer diskutiert.

Ein großer Vorteil dieser Flugzeitspektrometer liegt darin, daß Elektronen mit verschiedenen Energien gleichzeitig nachgewiesen werden können, d.h. es können mehrere Reaktionskanäle gleichzeitig erfaßt werden. Diese Tatsache verkürzt die notwendige

---

<sup>1</sup>Das Spektrometer von Lindle ist aufgrund einer anderen Feldgeometrie für den winkelaufgelösten Nachweis von langsamen Elektronen mit  $E_{\text{kin}} < 0,5 \text{ eV}$  besser geeignet.

<sup>2</sup>siehe Abschnitt 2.4

Meßdauer, und sie vereinfacht den direkten Vergleich verschiedener Kanäle miteinander. Der Vorteil der reduzierten Meßzeit wird allerdings dadurch wieder aufgehoben, daß die Methode der Flugzeitmessung nur angewendet werden kann, wenn das Synchrotronlicht gepulst vorliegt. In diesem Betriebsmodus erzeugt das Synchrotron aber einen bei weitem geringeren Photonenfluß als im kontinuierlichen Betrieb, was verminderte Reaktionsraten zur Folge hat.

### 3.2.2 Messungen mit elektrostatischen Ablenkanalysatoren

Eine weitere Klasse von Spektrometern, die seit Jahrzehnten weitläufig verwendet wird, basiert auf zylindrischen elektrostatischen Ablenkanalysatoren<sup>3</sup> (siehe Abb. 3.4).

Elektronen, die innerhalb der Reaktionszone erzeugt wurden, können durch schmale Eingangsschlitze in die Spektrometer eintreten. Je nach angelegter Spannung zwischen den beiden gekrümmten Elektrodenplatten innerhalb der Spektrometer gelangen nur Elektronen einer gewissen Energie zu den Detektoren. Mit diesen Spektrometern kann also nicht direkt die Energie der Elektronen gemessen werden, sondern nur die Rate der Elektronen, die exakt die Energie besitzen, auf die das Spektrometerfeld zuvor eingestellt wurde. Ein Spektrum der kinetischen Energien der Elektronen kann daher nur durch ein Scannen der Akzeptanzenergie des Spektrometers aufgenommen werden. Daraus ergeben sich sehr lange Aufnahmezeiten, da dieser Scan bei jeder neu eingestellten Photonenenergie wiederholt werden muß, um ein neues Energiespektrum aufzunehmen. Um die Meßzeit zu verkürzen, kann ein anderer Meßmodus gewählt werden: Bei jedem Schritt, mit dem die Photonenenergie um  $\Delta E_\gamma$  erhöht wird, wird auch die Spannung innerhalb des Spektrometers entsprechend erhöht, damit nun Elektronen nachgewiesen werden, deren kinetische Energie um  $\Delta E_\gamma$  höher liegt als bei der Messung zuvor. D.h. es werden während der gesamten Messung immer nur Elektronen nachgewiesen, die zu einem bestimmten  $He_{(N)}^+$ -Endzustand gehören. Die verschiedenen Kurven  $\sigma_N(E_\gamma)$  werden in diesem Modus nacheinander aufgenommen. Dieser Modus heißt CIS für „Constant Ionic State“ im Gegensatz zu PES für „Photoelectron Spectrums“, der zuvor beschrieben wurde. Messungen im CIS-Modus sind zwar schneller, sie bringen aber die Notwendigkeit mit sich, die unabhängig voneinander aufgenommenen Kurven  $\sigma_N(E_\gamma)$  sehr genau auf eine konstante Photonenrate zu normalisieren, um sie miteinander vergleichen zu können.

Zubek *et al.* [52] haben 1991 den partiellen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{N=2}(E_\gamma)$  und die Winkelverteilung der Elektronen  $\beta_{N=2}(E_\gamma)$  als Funktion der Photonenenergie  $E_\gamma$  gemessen. Im Gegensatz zu den weiter oben beschriebenen Messungen, die nur an einzelnen Photonenenergien durchgeführt wurden, haben Zubek *et al.* den Bereich zwischen  $E_\gamma=68,8$  eV und  $E_\gamma=76,9$  eV - d.h. bis zur Schwelle für  $He_{(N=5)}^+$  - erstmals durchgehend abgedeckt (siehe Abb. 3.3).

---

<sup>3</sup>Abgekürzt durch CDA für *engl.* „Cylindrical Deflector Analyzer“

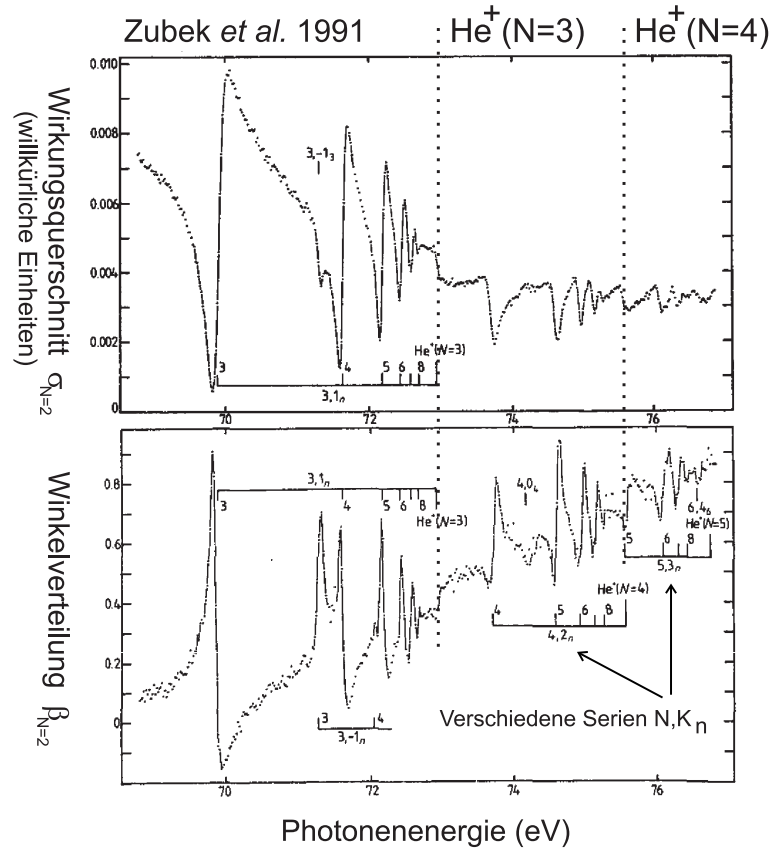


Abbildung 3.3: Messung von Zubek *et al.* [52]: Der partielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{N=2}$  und  $\beta_{N=2}$ -Parameter für den Reaktionskanal mit dem Endzustand  $\text{He}^+_{(N=2)}$ . Deutlich zu erkennen ist die Korrelation zwischen  $\sigma$  und  $\beta$  und das Absinken der Reaktionsrate an den Stellen, an denen ein neuer Reaktionskanal ( $\text{He}^+_{(N=3,4)}$ ) möglich wird.

### 3.2.3 Partielle Wirkungsquerschnitte $\sigma_N$ und $\beta_N$ für $\text{He}^+_{(N>2)}$

Menzel *et al.* haben 1995 erstmals partielle Wirkungsquerschnitte  $\sigma_N$  der Einfachionisation von Helium für  $N > 2$  gemessen [55, 56]. Bei diesem Experiment wurden ebenfalls die emittierten Elektronen spektroskopiert. Die Messungen erfolgten bei einer Photonenenergie zwischen 70,5 eV und 76,8 eV, d.h. in einer Region, die unterhalb der  $\text{He}^+_{(N=3)}$ -Schwelle beginnt und bis  $\text{He}^+_{(N=5)}$  reicht.

Der Synchrotronstrahl wurde durch einen wenige  $\text{cm}^3$  großen Bereich geleitet (einer kleinen Gaszelle ähnlich), in dem sich Helium bei einem konstanten Druck von ca.  $10^{-4}$  mbar befand. Das Kernstück des Experiments wurde von zwei Elektronenspektrometern gebildet, die um die Reaktionszone herum angeordnet sind (siehe Abb. 3.4). Die gleichzeitige Verwendung von zwei Spektrometern hat den bedeutenden Vorteil, daß der  $\beta$ -Parameter direkt während einer Messung bestimmt werden kann. In der Messung von Zubek beispielsweise mußten zu diesem Zweck zwei unabhängige Kurven aufgenommen werden, die anschließend auf eine konstante Photonenrate hin normalisiert

und dann miteinander verrechnet werden mußten, um den Verlauf des  $\beta$ -Parameters zu ermitteln. Mit der gleichzeitigen Verwendung von zwei Spektrometern in der Apparatur von Menzel *et al.* wird dieses Problem umgangen. Der Aufbau von Menzel *et al.* ist detailliert in [57] beschrieben.

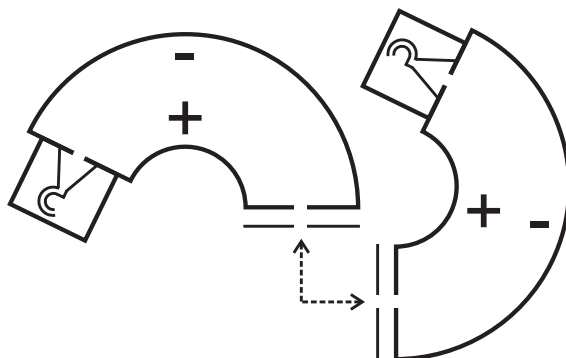


Abbildung 3.4: Die Spektrometeranordnung von Menzel *et al.* Zwei Elektronenspektrometer sind rechtwinklig um den Photonenstrahl herum angeordnet. Der Photonenstrahl steht senkrecht zur Ebene der Zeichnung. Je nach angelegter elektrischer Spannung zwischen den Elektroden können nur Elektronen mit einer bestimmten kinetischen Energie zu den Detektoren (Channeltrons) gelangen. Der Aufbau ist detailliert in [57] beschrieben.

### 3.3 Die Notwendigkeit einer neuen Technik

#### Die Grenzen der traditionellen Methoden

In den vorhergehenden Abschnitten wurden verschiedene Meßmethoden vorgestellt. All diese Techniken unterliegen gewissen Einschränkungen, die ihre Anwendungsmöglichkeit für die Untersuchung von doppelt hoch angeregten Zuständen in unmittelbarer Nähe unterhalb der Doppelionisationsschwelle beschränken bzw. sogar ausschließen. In diesem Bereich, d.h. innerhalb des letzten Elektronenvolts unterhalb der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV, besteht das größte Problem in den sehr geringen partiellen Wirkungsquerschnitten in diesem Bereich. Sie liegen für  $He_{(N>8)}^+$  typischerweise unter einem Kilobarn [64].

Die Messung des totalen Wirkungsquerschnittes mit Hilfe von Gaszellen ist auf recht hohe Reaktionsraten in der Größenordnung um  $5 \cdot 10^6 \text{ sec}^{-1}$  angewiesen, da hierbei der Ladungsstrom der produzierten Teilchen gemessen wird. Erschwerend kommt hinzu, daß die unteren Reaktionskanäle  $He_{(N=1,2,3)}^+$  ca. 99,9% des Teilchenstroms ausmachen, d.h. die Signaländerungen der hoch angeregten Zustände werden von einem ca. drei Größenordnungen stärkeren Hintergrundsignal dominiert. Aus diesem Grund sind sehr lange Meßzeiten notwendig, um die statistischen Fehler so weit abzusenken, daß die Strukturen der schwachen Resonanzen, die nur ca. 0,1% des Signals ausmachen, zuverlässig abgetastet werden können. Abgesehen von diesen technischen Schwierigkeiten



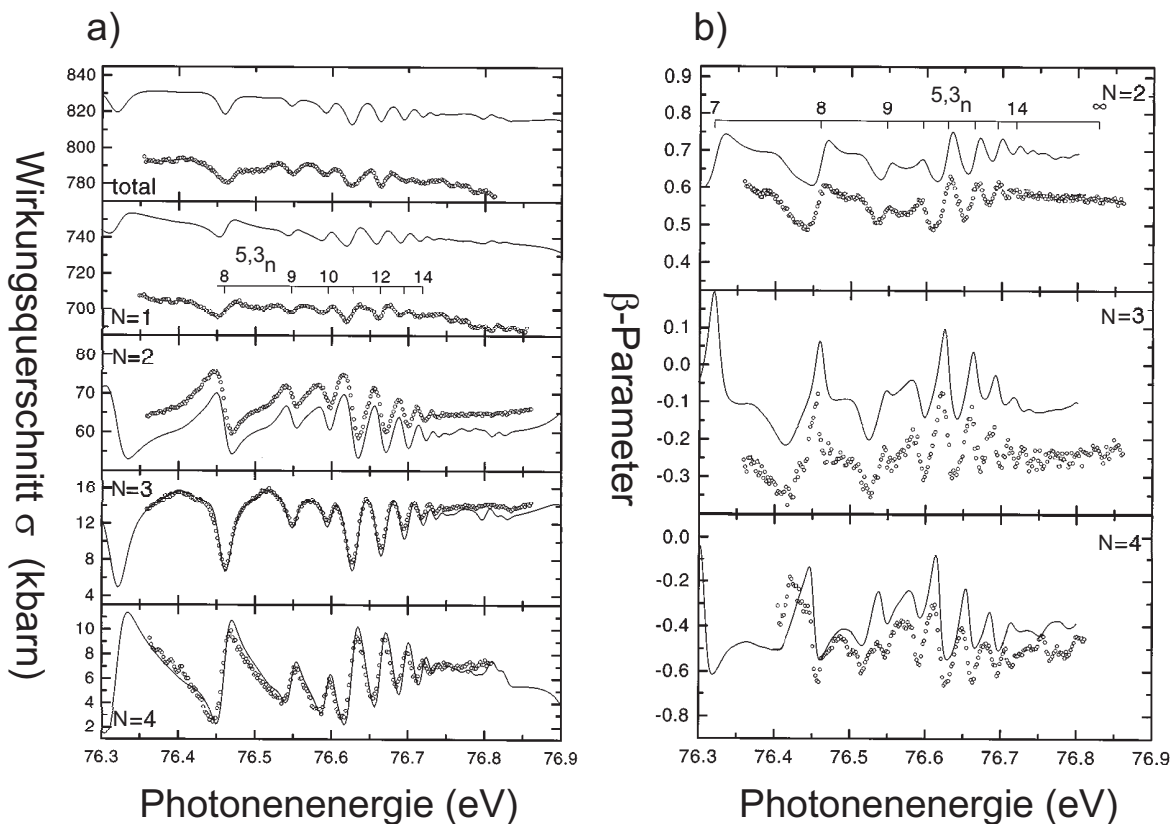


Abbildung 3.5: Messung von Menzel *et al.* [56] (o Messung, - Theorie [55]). **a)** Partielle Wirkungsquerschnitte für  $He^+_{(N<5)}$ . Ein Vergleich dieser differenzierten Daten mit dem totalen Wirkungsquerschnitt aus Abb. 2.6 auf Seite 13 zeigt im Bereich um ca. 76,6 eV, wie sich die Anwesenheit der 6, 4<sub>6</sub>-Resonanz auf Mitglieder der 5, 3<sub>n</sub>-Serie auswirkt. **b)**  $\beta$ -Parameter der emittierten Elektronen für  $He^+_{(N=2,3,4)}$ .

stellt sich die Frage nach dem Informationsgehalt solcher Messungen in dieser Region, da sich hier die Mitglieder verschiedenster Resonanzserien gegenseitig überlappen und miteinander interferieren. Der totale Wirkungsquerschnitt als einzige Meßgröße reicht daher in dieser Region für die Untersuchung der zugrundeliegenden Physik nicht mehr aus.

Hier liegt der entscheidende Vorteil der Nachweismethoden, die die Unterscheidung zwischen verschiedenen  $He^+$ -Endzuständen ermöglichen. Dabei werden die kinetischen Energien der emittierten Elektronen und eventuell sogar ihre Emissionsrichtung gemessen. Diese Verfahren wurden im vorhergehenden Abschnitt beschrieben. Da es sich hierbei um die Spektroskopie von sehr langsamen Elektronen handelt ( $E_{\text{kin}} < 0,5$  eV), müssen der Reaktionsbereich und die Spektrometer vom Erdmagnetfeld abgeschirmt werden. Außerdem muß durch ein kompliziertes System aus Elektroden, elektrostatischen Linsen und Abschirmungen das Feld am Reaktionsort so modelliert werden, daß die kinetische Energie der Elektronen und ihre Emissionsrichtung unverfälscht gemessen werden.

Die schwerwiegendsten Probleme sind jedoch mit der geringen Raumwinkelakzeptanz solcher Spektrometer verbunden. Üblicherweise erfassen sie nur einen Raumwinkelbereich um die Reaktionszone von ca.  $5^\circ$ . Elektronen, die in andere Richtungen emittiert werden, werden nicht nachgewiesen. Weit über 99,5% des gesamten Raumwinkelbereichs werden daher nicht erfaßt. Die notwendigen Meßzeiten vergrößern sich dadurch beträchtlich. Im Falle von Spektrometern, die jeweils nur auf eine Akzeptanzenergie eingestellt werden können, vervielfacht sich die Meßdauer entsprechend um die Anzahl der Reaktionskanäle.

Ein weiterer Nachteil besteht darin, daß aus Zeitgründen nur an zwei bis drei Winkelpositionen gemessen wird und dann unter Zuhilfenahme von Gl. 2.16 (Seite 21) der Rest der Winkelverteilung extrapoliert wird. Feldverzerrungen innerhalb des Spektrometers, die evtl. erst nach den Eichmessungen auftreten oder echte sogenannte Nicht-Dipol-Effekte in den Winkelverteilungen werden so nur schwer nachgewiesen.

### Überwindung der Probleme mit einer neuen Technik

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine bereits bestehende Technik modifiziert und speziell für die Spektroskopie von niederenergetischen Elektronen optimiert. Mit der neuen Methode, die in den folgenden Kapiteln vorgestellt wird, werden die Probleme, die im vorhergehenden Abschnitt beschrieben wurden, weitgehend gelöst.

Das System arbeitet ohne komplizierte Feldkonfigurationen und funktioniert ohne Magnetfeldabschirmung. Es werden Elektronen aus unterschiedlichen Reaktionskanälen simultan erfaßt. Von jedem emittierten Elektron werden die kinetische Energie und die Emissionsrichtung nachgewiesen. Dabei wird der gesamte Raumwinkelbereich überwacht. Erst ab einer kinetischen Energie von ca. 2 eV nimmt die Raumwinkelakzeptanz leicht ab. Durch den koinzidenten Nachweis zwischen Elektronen und  $He^+$ -Ionen ist eine sehr effektive Unterdrückung von fehlerhaften Signalen und Sekundärelektronen möglich.

Eine weitere positive Eigenschaft ist mit der Art der Aufnahme und der späteren Datenauswertung im Computer verbunden. Von jedem nachgewiesenen Teilchen werden die Flugzeit und der Auftreffort auf dem Detektor aufgezeichnet. Das ermöglicht es, das gesamte Experiment im nachhinein mit Hilfe des Computers virtuell zu wiederholen. In den Auswertungsalgorithmen werden das Erdmagnetfeld und das homogene Spektrometerfeld analytisch berücksichtigt. Das ermöglicht weitgehende Korrektur- und Diagnosemöglichkeiten, wodurch Störeinflüsse auf die Flugbahnen der Elektronen erkannt und nachträglich kompensiert werden können. Aufgrund dieser Eigenschaften ist die Methode ideal zur Untersuchung von hoch angeregten Zuständen dicht unterhalb der Doppelionisationsschwelle geeignet.

# Kapitel 4

## Das Meßprinzip

Das Ziel der Messung ist der Nachweis von Elektronen, die in Folge von Photoionisation von Heliumatomen entstehen. Die gewählte Energie der Photonen soll dicht unterhalb der Doppelionisationsenergie von Helium in der Region zwischen ca. 78 eV und 79 eV liegen, um doppelt hoch angeregte Zustände zu erzeugen, die durch Autoionisation zerfallen. Die zurückbleibenden  $He^+$ -Ionen besitzen ein diskretes Spektrum von Energieeigenwerten, die analog zum Wasserstoffatom mit der Hauptquantenzahl  $N$  assoziiert werden. Aufgrund des reinen  $1/r$ -Potentials sind die jeweiligen Drehimpulszustände wie beim Wasserstoffatom nahezu entartet. Der Messung zugänglich ist daher nur die Hauptquantenzahl  $N$ . Aufgrund des Energieerhaltungssatzes weist das Spektrum der kinetischen Energien der Elektronen ebenfalls diskrete Werte auf. Ist die kinetische Energie des emittierten Elektrons und die Energie des absorbierten Photons bekannt, so kann dadurch auf die Hauptquantenzahl  $N$  des Endzustandes des  $He^+$ -Ions rückgeschlossen werden. Eine weitere Meßgröße ist die Emissionsrichtung der Photoelektronen relativ zum Polarisationsvektor der Photonen.

Die Apparatur soll diese Photoelektronen winkelaufgelöst nachweisen können und ihre kinetische Energie im Bereich zwischen 0 und ca. 2 eV so genau messen, daß die verschiedenen Energiezustände voneinander getrennt werden können. Dabei müssen einige physikalische und technische Rahmenbedingungen von Anfang an berücksichtigt werden:

1. Die partiellen Wirkungsquerschnitte für die zu untersuchenden Prozesse sind sehr klein (ca. 1 kBarn). Um die Meßdauer in einem akzeptablen Rahmen zu halten, muß das System daher in allen Raumrichtungen sensitiv sein - d.h. es muß eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  aufweisen.
2. Aufgrund der niedrigen partiellen Wirkungsquerschnitte muß das verwendete Helium-Gastarget sehr dicht sein, damit eine ausreichende Reaktionsrate erreicht wird.
3. Störfelder wie beispielsweise das Erdmagnetfeld, Elektromagnetische Wechselfelder der Elektronik usw. müssen berücksichtigt werden, da sie besonders die Flugbahnen der langsamen Elektronen ( $E_{\text{kin}} < 0,5$  eV) beeinflussen.

4. Ein Großteil der Photoelektronen stammt aus Reaktionen, in denen das  $He^+$ -Ion in einen niedrigen Zustand mit den Hauptquantenzahlen  $N=1,2,3$  gefallen ist. Diese Elektronen besitzen hohe kinetische Energien und können daher beim Auftreffen auf Oberflächen Sekundärelektronen herausschlagen. Der Anteil dieser störenden Elektronen ist ca. drei Größenordnungen stärker als der der niederenergetischen Elektronen, die eigentlich Gegenstand der Messung sind. Eine sichere Unterscheidungsmöglichkeit zwischen diesen verschiedenen Prozessen ist daher für das Gelingen der Messung unverzichtbar.

Mit Hilfe einer Computersimulation wurde das gesamte Meßprinzip entwickelt und überprüft (Anhang A). Die Simulation ermöglichte es, die Parameter des Spektrometers und des Gasjetsystems zu optimieren und dabei sogar diverse störende Einflüsse zu berücksichtigen.

Das im folgenden beschriebene Konzept basiert auf einer Technik, die innerhalb der letzten 20 Jahre unter anderem in der Arbeitsgruppe um Professor Schmidt-Böcking im Frankfurter Institut für Kernphysik unter dem Namen „COLTRIMS“ entwickelt wurde<sup>1</sup> [60]. Die Abkürzung steht für „Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy“. Ursprünglich wurde diese Meßmethode für atomare Stoßprozesse entwickelt, bei denen die direkte Spektroskopie von Elektronen technisch sehr schwierig war. Statt dessen wurde versucht, die Impulse der bei den Reaktionen entstehenden Ionen zu vermessen, um dann anhand des Energie- und Impulserhaltungssatzes auf den Impuls des emittierten Elektrons zu schließen. Da die kinetischen Energien der Ionen nach atomaren Stoßprozessen oftmals sehr gering sind, muß die ursprüngliche Impulsverteilung des Probengases (auch Target genannt) sehr klein sein. Praktisch bedeutet das, daß das zu untersuchende Gas auf eine Temperatur nahe dem absoluten Nullpunkt abgekühlt werden muß, was beispielsweise durch eine schnelle adiabatische Expansion erreicht werden kann. Heutzutage sind viele technische Probleme überwunden, so daß das Meßprinzip auch auf Elektronen direkt angewendet werden kann. Dabei ist der Einsatz nicht auf gasförmige Targets beschränkt. Es sind bereits erfolgreich Experimente an Festkörperoberflächen [68, 69] durchgeführt worden und der Einsatz eines superfluiden Heliumstrahls ist für die nahe Zukunft geplant.

## 4.1 Übersicht

Ein ca. 3 mm schmaler Heliumgasstrahl wird mit dem vom Synchrotron produzierten Lichtstrahl gekreuzt. Innerhalb dieser Kreuzungszone können Reaktionen stattfinden. Mit Hilfe eines schwachen elektrostatischen Führungsfeldes werden die frei werdenden Elektronen und  $He^+$ -Ionen getrennt und auf zwei ortsauflösende Detektoren gelenkt. Das elektrostatische Feld wird mit Hilfe des Spektrometers - einer Kombination von Kupferplattenelektroden - möglichst homogen über den Bereich zwischen der Reaktionszone und den Detektoren angelegt. Anhand der gemessenen Flugzeiten und Auf-

---

<sup>1</sup>An dieser Entwicklung beteiligt waren unter anderem die Gruppen um Prof. J. Ullrich und Prof. L. Cocke.

treffpositionen auf den Detektoren können die Impulse des Elektrons und des  $He^+$ -Ions individuell für jede einzelne Reaktion berechnet werden.

Der koinzidente Nachweis der beiden Teilchen ermöglicht es, in der anschließenden Datenanalyse „echte“ Elektronen und Sekundärelektronen zu trennen (siehe Kapitel 5.4).

Ein Großteil der Apparatur dient der Erzeugung des Überschallgasjets (für eine detaillierte Beschreibung siehe Abschnitt 4.4). Unter großem Druck wird Helium aus einer Düse gepreßt. Das Gas wird bei der anschließenden Expansion schlagartig auf eine interne Temperatur von wenigen Kelvin abgekühlt. Die Gasteilchen innerhalb des Jets erreichen dabei Überschallgeschwindigkeit. Mit Hilfe eines schmalen Trichters (sog. „Skimmer“) wird aus der anfänglich breiten Gasverteilung eine schmale Säule herausgeschnitten.

Der Jet gelangt nun in die Hauptkammer und wird vom Lichtstrahl gekreuzt. Nur der aller kleinste Teil der Heliumatome absorbiert ein Photon. Der Rest muß sehr effizient aus der Hauptkammer herausgeleitet werden, damit sich das Hauptkammervakuum nicht zu stark verschlechtert. Zu diesem Zweck wird der Jet durch eine kleine Öffnung in einen besonders gut gepumpten Bereich - den Jetdump - geleitet.

Mit diesem Verfahren wird eine wichtige Voraussetzung erfüllt: Die Erzeugung eines dichten, sehr kalten Gastargets, das exakt im Fokus der Synchrotronstrahlung platziert werden kann und doch nicht das Vakuum innerhalb der Hauptkammer bedeutend verschlechtert.

## 4.2 Strahlführung

Unmittelbar nachdem der Photonenstrahl das letzte Ventil der Strahlrohrs (Beamline) passiert hat, hat er eine Ausdehnung von ca.  $8 \times 3$  mm. Der Fokus befindet sich ca. 1,2 m entfernt. Direkt nach dem Ausgang der Beamline befindet sich eine differentielle Pumpstufe. Dabei handelt es sich um eine Kombination aus zwei Lochblenden und einer dazwischen montierten Turbomolekularpumpe. Die Pumpstufe erfüllt zum einen den Zweck, das an der Beamline anliegende Vakuum zu verbessern, und zum anderen eventuell vorhandene Streukomponenten des Photonenstrahls - beispielsweise ein Halo - auszukollimieren. Dieser Punkt ist sehr wichtig, da unbedingt vermieden werden muß, daß Teile der Synchrotronstrahlung auf Oberflächen innerhalb der Experimentierkammer auftreffen. Die Folge davon wäre eine große Menge von Photoelektronen, die im Extremfall sogar die Detektoren durch Überlastung beschädigen können.

Hinter der differentiellen Pumpstufe befindet sich ein Wellschlauch, der es erlaubt, die Kammer relativ zur Beamline flexibel auszurichten. Zwischen Wellschlauch und Experimentierkammer ist eine weitere Lochblende angebracht. Der Strahl tritt nun in die Hauptkammer ein. Er passiert eine von außen verstellbare horizontal verschiebbare Blende und durchquert das Spektrometer. In der Mitte des Spektrometers trifft er auf den Gasjet, der an dieser Stelle ca. 3 mm breit ist. Die Kammer muß so positioniert sein, daß der Fokus des Lichtstrahls exakt im Mittelpunkt des Spektrometers liegt. An

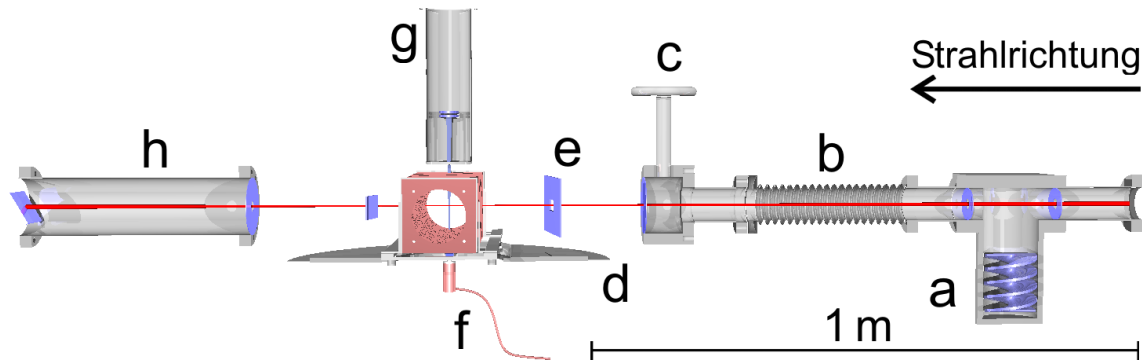


Abbildung 4.1: a) Differentielle Pumpstufe, b) Wellschlauch, c) Ventil mit Lochblende, d) Kammerboden, e) Horizontal verschiebbare Lochblende, f) Gasdüse und Zuleitung, g) Jetdump, h) Beamdump mit Absorptionsplatte

dieser Stelle hat der Photonenstrahl eine Ausdehnung von ca.  $0,1 \text{ mm} \times 0,05 \text{ mm}$  (hor.  $\times$  vert.). Unmittelbar hinter dem Spektrometer kann eine mit Zinksulfit bestrichene Glasplatte in den Strahl geschoben werden. Durch die Synchrotronstrahlung wird das Zinksulfit zum Fluoreszieren angeregt. Dabei wird ein intensiv leuchtender, tief blauer Punkt sichtbar, der durch den Glasflansch am Ende des Beamdumps betrachtet werden kann. Dieser Strahlmonitor ist sehr hilfreich beim Justieren und Überprüfen der Kammerposition bzw. der Lage des Photonenstrahls bei laufendem Betrieb.

Anschließend tritt der Strahl aus der Hauptkammer aus und befindet sich dann in einem langen Rohrstück, dem sogenannten Beamdump, an dessen Ende der Photonenstrahl absorbiert wird. Es ist wichtig, daß dabei keine Photonen reflektiert werden und zurück in die Hauptkammer gelangen, wo sie große Mengen von Photoelektronen aus den Oberflächen des Spektrometers schlagen könnten. Daher ist es günstig, den Beamdump so lange wie möglich zu gestalten und mit Hilfe einer Lochblende optisch weitgehend von der Hauptkammer zu trennen. Am Ende des Beamdumps befindet sich eine mit Zinksulfit bestrichene Kupferplatte, die die Photonen sehr effektiv absorbiert.

Die Positionierung der gesamten Apparatur relativ zum Photonenstrahl muß sehr präzise sein, damit der Lichtstrahl den Gasjet optimal trifft und nicht Teile des Spektrometers und der Blenden streift.

An der Beamline U125/1-PGM am BessyII können der Undulator und der Monochromator in eine spezielle Position gefahren werden, so daß sichtbares Licht produziert wird<sup>2</sup>. Dieses Licht wird nicht vom Undulator erzeugt, sondern von einem davorliegenden Ablenkmagneten im Synchrotronring. Der sichtbare Anteil dieses Lichts wird vom Glasventil am Ende der Beamline nicht absorbiert. Anhand dieses Lichtstrahls kann das System auf ca. 1 mm genau ausgerichtet werden. An anderen Meßplätzen ist dies oftmals nicht möglich. In solchen Fällen muß die Apparatur „blind“ mit Hilfe von Theodolithen und Nivelliergeräten anhand von Peilmarken ausgerichtet werden.

Bei der Strahljustage mit Hilfe der „nullten Ordnung“ muß beachtet werden, daß der

<sup>2</sup>Die sogenannte „nullte Ordnung“.

Quellpunkt des Lichts im Ablenkmagneten liegt und nicht im Undulator. Das kann zu einem leichten Positionsunterschied zwischen dem Strahl der nullten Ordnung und der vom Undulator erzeugten Synchrotronstrahlung führen. In diesem Fall war der Unterschied nach Aussage der Beamlinekonstrukteure jedoch vernachlässigbar gering.

## 4.3 Das Vakuumsystem

Das Spektrometer und die Detektoren müssen sich im Vakuum befinden, da die emittierten Teilchen auf ihrem Weg zu den Detektoren nicht gegen andere Teilchen stoßen dürfen. Mehrere andere Gründe machen ein Hochvakuum unverzichtbar: Die Erzeugung eines Überschallgasjets ist nur im Vakuum möglich. Des weiteren können die verwendeten Detektoren erst ab einem Druck von unter  $10^{-5}$  mbar sicher betrieben werden. Außerdem soll der Lichtstrahl nur an einer genau definierten Stelle mit Teilchen reagieren. Daher muß der restliche Bereich weitgehend frei von Restgas sein. Das Vakuum innerhalb der Hauptkammer wurde mit mehreren Vakuumpumpen erzeugt. Insgesamt betrug die Pumpleistung an der Hauptkammer 960 l/s.

Bei den Pumpen handelt es sich um sogenannte Turbomolekularpumpen. Sie können erst ab einem Vakuumdruck von unter  $10^{-2}$  mbar arbeiten, da sonst die Rotoren die Umdrehungszahlen von bis zu 1000 U/s nicht erreichen bzw. die Pumpen durch Überhitzung beschädigt werden. Diese Pumpen müssen mit weiteren Vorpumpen unterstützt werden, da sie nicht direkt gegen den Atmosphärendruck arbeiten können. Durch die relativ große Pumpleistung konnte auf ein Ausheizen der Apparatur verzich-

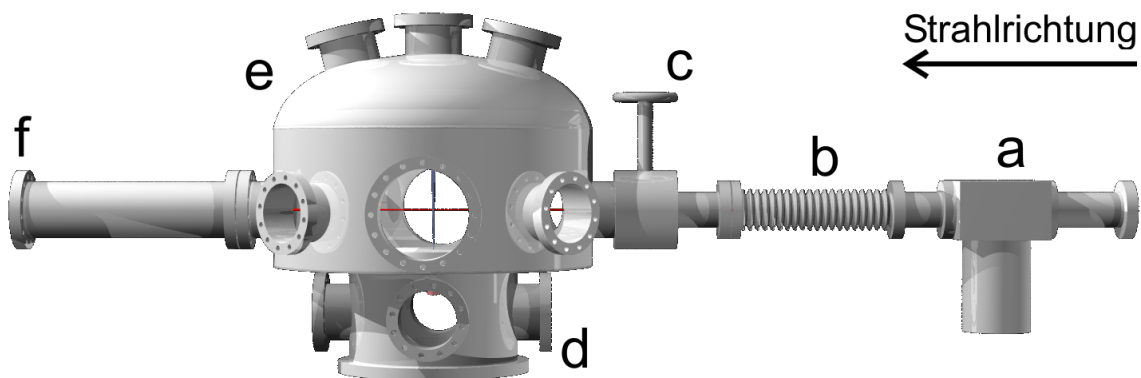


Abbildung 4.2: **a)** Differentielle Pumpstufe mit Pumpe, **b)** Wellenschlauch, **c)** Ventil mit Lochblende, **d)** Quellkammer ohne Pumpe, **e)** Hauptkammer ohne Pumpen und Anschlüsse (60 cm Durchmesser), **f)** Beamdump

tet werden. Unter Verwendung einer  $LN_2$ -Kühlfalle<sup>3</sup> wurde bei abgeschaltetem Gasjet ein Druck von  $1,8 \cdot 10^{-8}$  mbar erreicht. Der Druck im Ausgangsbereich der Beamline muß etwa eine Größenordnung geringer sein.

<sup>3</sup> $LN_2$  steht allgemein für „Liquid Nitrogen“ (Flüssiger Stickstoff).

Die Quellkammer, in der sich die Gasdüse befindet, ist von der Hauptkammer vollständig getrennt, da in ihr bei laufendem Betrieb ein um ca. 6 Größenordnungen höherer Druck vorherrscht. Aufgrund des bei der Erzeugung des Gasjets entstehenden hohen Gasanfalls mußte die Quellkammer mit einer leistungsstarken Pumpe (2200 l/s) versehen werden. Zwischen dieser Pumpe und der Vorpumpe mußte eine weitere Turbomolekularpumpe (500 l/s) als zusätzliche Kompressionsstufe zwischengeschaltet werden.

## 4.4 Das Gastarget

Das Gastarget besteht aus einem schmalen Helium-Gasstrahl, der in die Hauptkammer geleitet wird und in der Mitte des Spektrometers den Photonenstrahl kreuzt. Dieser Strahl wird Jet genannt. Der größte Anteil der Gasteilchen geht dabei keine Reaktion ein und verläßt das Spektrometer. Damit sich das Gas anschließend nicht in der Hauptkammer verteilt, muß es unmittelbar nach Verlassen des Spektrometers abgefangen werden. Diese Funktion übernimmt der Jetdump - ein Rohrstück, das nur durch ein kleines Einlaßloch mit der Hauptkammer verbunden ist (siehe Bild 4.3).

Durch dieses Loch strömt der Gasjet ein und wird mit Hilfe einer Turbomolekularpumpe abgepumpt. Dadurch wird ein Rückströmen in die Hauptkammer weitgehend vermieden.

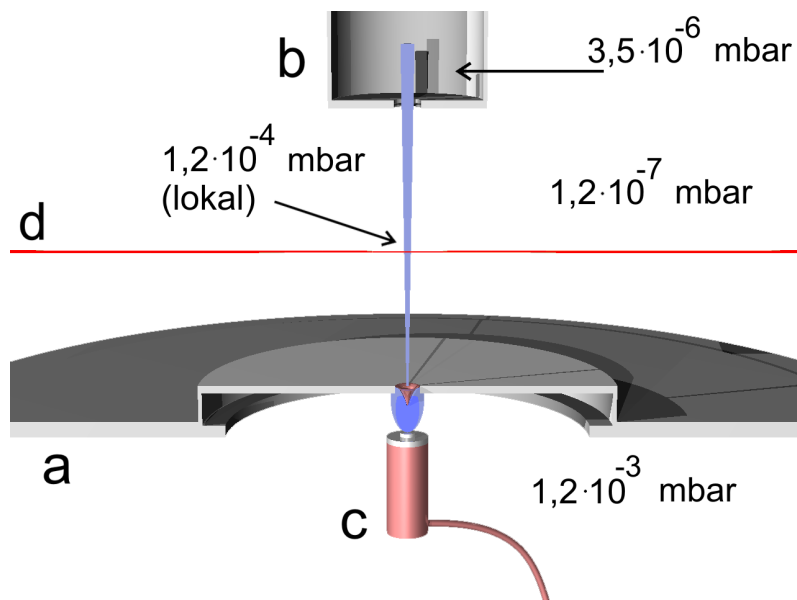


Abbildung 4.3: **a)** Boden der Hauptkammer, **b)** Jetdump (ohne Pumpe dargestellt), **c)** Düse mit darüberliegendem Skimmer, **d)** Photonenstrahl (Das Spektrometer und die Detektoren sind nicht dargestellt.)



### Erzeugung des Gasjets

Helium wird mit einem Druck von ca. 30 bar durch eine 30  $\mu\text{m}$  breite Kapillardüse nahezu adiabatisch expandiert. Die Düse befindet sich in einer separaten Vakuumkammer, die von der Hauptkammer getrennt ist (Bild 4.2 d, S. 35). Das Gas expandiert nach Verlassen der Düse schockartig. Innerhalb der Expansionskammer herrscht ein Druck von ca.  $10^{-3}$  mbar. Bei der Expansion des Gases muß daher keine Arbeit geleistet werden. Somit kann die gesamte freie Enthalpie  $h_0 = 5kT/2$ , die im Mittel einem Gasteilchen zur Verfügung steht, in gerichtete Bewegung umgewandelt werden. Dabei kühlt sich das Gas auf eine Temperatur nahe dem absoluten Nullpunkt ab. Nun wird mit Hilfe eines kleinen Trichters - dem Skimmer - ein schmaler Bereich aus der Expansionszone herausgeschnitten und in die Hauptkammer zum Spektrometer geleitet.

Das untere Ende des Skimmers befindet sich ca. 10 mm von der Düse entfernt und hat einen Durchmesser von 0,3 mm. Diese Parameter bestimmen die spätere Ausdehnung des Gasjets an dem Ort, wo er den Photonenstrahl kreuzt (ca. 8 cm oberhalb des Skimmers).

Unmittelbar nach der Expansion tauschen die Teilchen kaum Stöße untereinander aus. Nach einer gewissen Wegstrecke treffen sie jedoch auf das Restgas innerhalb der Quellkammer. Die Ordnung der Bewegung wird dadurch zerstört. Der Skimmer muß deshalb in den inneren Bereich, die sogenannten Zone of Silence, eingetaucht werden (siehe Bild 4.4). Die Größe der Zone of Silence hängt vom Düsenvordruck und dem Druck innerhalb der Quellkammer ab.

Ein Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation (Anhang A) war, daß die Ausdehnung des Jets auf der Höhe des Photonenstrahls nicht größer als 3,5 mm sein sollte, damit Untergrundereignisse von guten Ereignissen getrennt werden können. Das bedeutet, daß sich der Skimmer ca. 10 mm von der Düse entfernt befinden muß. Die Zone of Silence muß somit größer als 10 mm sein (siehe Diskussion weiter unten). Ein Düsendruck von 30 bar führt aber zu einem großen Gasanfall innerhalb der Quellkammer und damit zu einem relativ hohen Druck, der wiederum die Zone of Silence verkürzt. Die Quellkammer mußte daher mit einer sehr leistungsfähigen Vakuumpumpe (2200 l/s) versehen werden, um im späteren Experiment auch einen Betrieb mit eventuell größeren Abständen zwischen Düse und Skimmer gewährleisten zu können.

### Physikalische Eigenschaften des Jets

Die mittlere Geschwindigkeit der Gasteilchen nach der Expansion beträgt

$$v = \sqrt{5 \frac{kT}{m_{He}}} \quad (4.1)$$

Für eine Düsensentemperatur von ca. 20 °C folgt daraus eine Jetgeschwindigkeit von ca. 1745 m/s. Das Spektrometer muß derart dimensioniert sein, daß die Flugzeiten der  $\text{He}^+$ -Ionen innerhalb des Spektrometers ausreichend kurz bleiben, damit sie noch auf der aktiven Detektorfläche auftreffen.

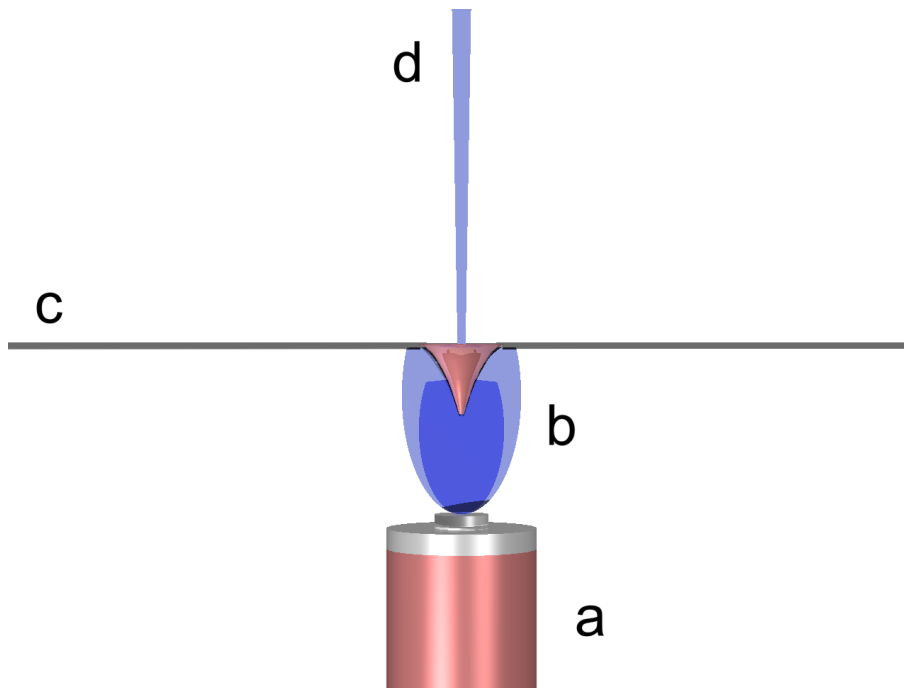


Abbildung 4.4: **a)** Düse (ca. 10 mm vom Skimmer entfernt), **b)** Expansionszone mit innenliegender Zone of Silence und außenliegender Schockfront, **c)** Boden der Hauptkammer, **d)** Gasjet

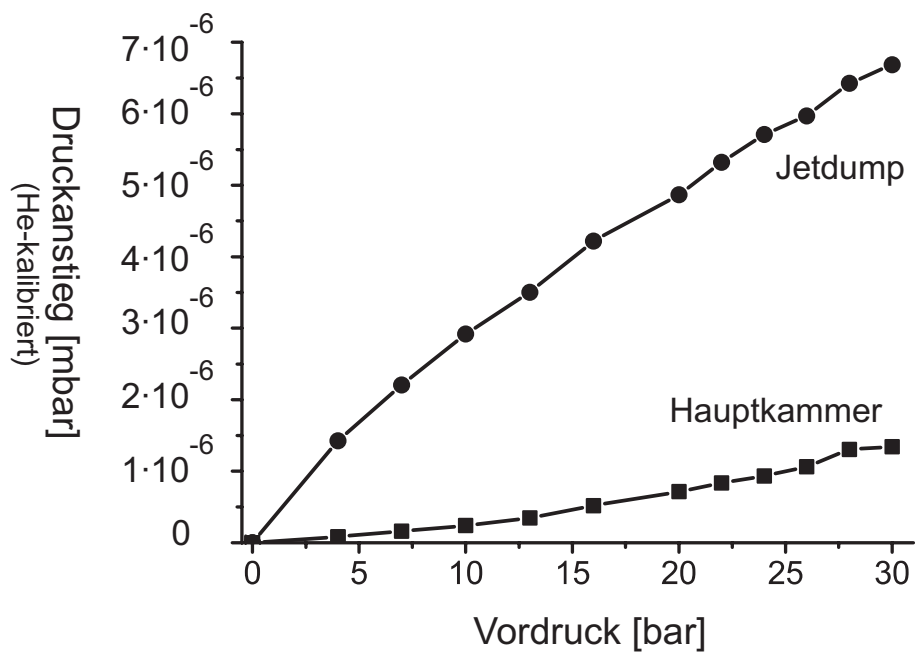


Abbildung 4.5: Druckanstieg im Jetdump bzw. in der Hauptkammer in Abhängigkeit vom Düsenvordruck.

Bei einer Testmessung wurde bei einem Vordruck von 30 bar ein Druckanstieg im Jetdump von ca.  $6,4 \cdot 10^{-6}$  mbar (kalibriert) gemessen. Das entspricht bei einer Pumpleistung von 220 l/s einem Teilchenstrom von ca.  $3,78 \cdot 10^{16}$  Teilchen pro Sekunde. Mit der weiter oben berechneten Geschwindigkeit von 1745 m/s und einem Jetdurchmesser von ca. 3,5 mm beim Durchgang durch den Photonenstrahl folgt daraus eine Teilchendichte von  $3,28 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  bzw. eine Flächenbelegungsichte entlang des Photonenstrahls von  $9,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Während des Experiments lagerten sich Verunreinigungen in der Düse ab. Aufgrund des verminderten Durchsatzes wurde im Jetdump nur ein Druckanstieg von ca.  $3,45 \cdot 10^{-6}$  mbar registriert<sup>4</sup>, was einer Targetdichte von  $6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  bzw. einem lokalen Druck von  $1,23 \cdot 10^{-4}$  mbar entspricht.

Bei der Konstruktion des Jetsystems wurde die Möglichkeit integriert, die Düse abzukühlen, indem sie über flexible Kupferstege mit einem Reservoir für flüssigen Stickstoff thermisch verbunden wurde. Damit konnte die Düse auf eine Temperatur von ca. 140 K abgekühlt werden<sup>5</sup>.

Eine Kühlung des Jets birgt zwei Vorteile. Zum einen wird die interne Impulsverteilung innerhalb des Gasjets verringert. Zum anderen wird die Dichte des Jets erhöht, da die Geschwindigkeit der Teilchen verringert wird. Eine Testmessung hat gezeigt, daß der Druckanstieg im Jetdump nahezu konstant bleibt, wenn der Jet gekühlt wird. Das bedeutet, daß sich die verringerte Jetgeschwindigkeit von ca. 1210 m/s direkt auf die Flächentargetdichte von nun  $1,38 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  auswirkt. Das ist eine Steigerung um ca. 40%. Die Jetkühlung wurde letztendlich während der Messung nicht angewandt, da die Targetdichte ausreichte und das häufige Nachfüllen des Stickstoffreservoirs bzw. die langen Abkühlzeiten von ca. 2 Stunden den kontinuierlichen Betrieb der Messung erschwert hätten.

Die interne Temperatur des Gasjets liegt nicht beliebig nahe am absoluten Nullpunkt. Das liegt vor allem daran, daß in der Quellschleife kein ideales Hochvakuum vorliegt. Das Verhältnis zwischen Düsentemperatur  $T_D$  und interner Temperatur des Jets  $T_{Jet}$  wird durch das Speedratio  $S$  beschrieben [63]. Dabei gilt

$$\frac{T_D}{T_{Jet}} = S^2 \frac{2}{5} \quad (4.2)$$

Der Wert des Speedratios ist abhängig von der Düsentemperatur  $T_D$ , dem Düsendurchmesser  $d_D$  und dem Vordruck  $p_D$ . Nach [63] führen  $T_D = 293 \text{ K}$ ,  $d_D = 30 \mu\text{m}$  und  $p_D = 30 \text{ bar}$  zu einem Speedratio von  $S = 80$  und damit zu einer Jettemperatur von  $T_{Jet} = 0,12 \text{ K}$ . Es muß aber davon ausgegangen werden, daß die Düse durch Verunreinigungen etwas verengt wird. Eine Verengung auf  $d_D = 25 \mu\text{m}$  hätte nur noch ein Speedratio von  $S = 40$  zur Folge ( $T_{Jet} = 0,46 \text{ K}$ ). Wird die Düse beispielsweise auf  $T_D = 100 \text{ K}$  abgekühlt, so ergibt sich  $S = 200 \dots 400$  und  $T_{Jet} < 6 \text{ mK}$ .

---

<sup>4</sup>Die Meßzelleneffizienz für Helium ist bereits berücksichtigt.

<sup>5</sup>Die Temperatur wurde mit einer Silizium-Diode gemessen, die in der Nähe der Düse befestigt war.

Die Länge der Zone of Silence wird durch

$$L_{ZoS} = \frac{2}{3} d_D \sqrt{\frac{p_D}{p_{quell}}} \quad (4.3)$$

berechnet, wobei  $p_{quell}$  der Druck innerhalb der Quellkammer in unmittelbarer Nähe der Düse ist. Es muß davon ausgegangen werden, daß der lokale Druck um ein Vielfaches höher ist als der in einiger Entfernung gemessene Wert. Ein Testlauf des Jetsystems ergab, daß sich bei  $p_D = 30$  bar ein Druck von  $p_{quell} = 10^{-3}$  mbar einstellt<sup>6</sup>. Daraus folgt eine Länge der Zone of Silence von ca. 3 cm, wenn angenommen wird, daß der lokale Druck um ca. eine Größenordnung über  $p_{quell}$  liegt.

### Justage des Jets

Das Jetsystem ist einstufig konzipiert, d.h. der Gasjet gelangt nach Verlassen des Skimmers direkt in die Hauptkammer. Das hat den Nachteil, daß Gasteilchen aus dem Hintergrundgas der Quellkammer durch das Loch des Skimmers in die Hauptkammer diffundieren können und dort das Vakuum verschlechtern - und zwar innerhalb des Spektrometers in unmittelbarer Nähe zur Reaktionszone. Aus diesem Grund muß bei einigen Experimenten dieses Typs ein separat gepumpter Trennbereich zwischen Quellkammer und Hauptkammer angebracht werden, der nur durch ein kleines Loch mit der Hauptkammer verbunden ist, um den Jet einzulassen.

Der hier verwendete einstufige Jet bietet den bedeutenden Vorteil, daß durch ein Verschieben der Düse relativ zum Skimmer die Achse des Gasjets verändert werden kann. Die Lage des Jets relativ zum Photonenstrahl kann dadurch sehr leicht optimiert werden, ohne dabei die gesamte Kammer verschieben zu müssen. Die optimale Position des Jets ist dann gefunden, wenn die Reaktionsrate innerhalb der Reaktionszone maximal ist. Diese sehr komfortable Art der Jetjustage ist mit einem zweistufigen System nicht möglich.

## 4.5 Das Spektrometer

Das elektrostatische Feld innerhalb des Spektrometers leitet die frei werdenden Teilchen auf die ortsempfindlichen Detektoren (Bild 4.7). Durch die Form des Feldes wird bestimmt, wie die drei Impulskomponenten der Teilchen auf den Detektoren abgebildet werden.

Das Spektrometer besteht zum größten Teil aus einer Aneinanderreihung von Kupferplatten (Bild 4.6). Die Kupferplatten (11,5 cm × 11,5 cm × 0,5 mm) sind in der Mitte ausgefräst, so daß ein zylindrischer Hohlraum entsteht ( $\varnothing=8,4$  cm). Die Platten dienen als Elektroden, die das elektrostatische Feld innerhalb des Spektrometers formen. Die Elektronen und  $He^+$ -Ionen, die bei den Reaktionen frei werden, werden durch das Feld getrennt und zu den Detektoren geleitet. Dadurch wird für Elektronen mit einer kinetischen Energie von  $E_{kin} < 2$  eV eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  erreicht.

---

<sup>6</sup>Dabei wurde der Konversionsfaktor der Meßzelle für Helium berücksichtigt.

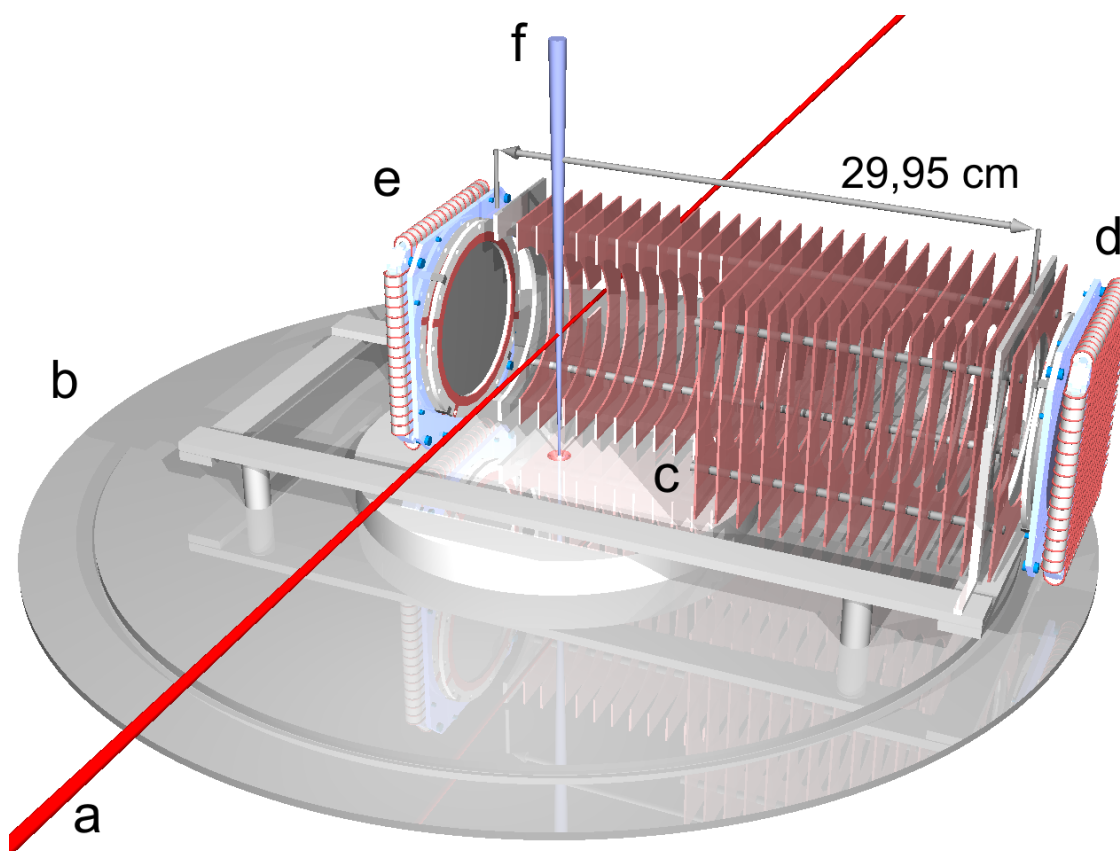


Abbildung 4.6: **a)** Photonenstrahl, **b)** Boden der Hauptkammer, **c)** Spektrometer im Querschnitt (nur jede zweite Platte ist dargestellt), **d)**  $He^+$ -Detektor, **e)**  $e^-$ -Detektor, **f)** Gasjet

Die Vorteile dieses Meßprinzips sind der Nachweis von mehreren Teilchen (hier  $e^-$  und  $He^+$ ) in Koinzidenz und die Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$ .

Spektrometer dieses Typs sind der Kern der oben erwähnten COLTRIMS-Technik. Durch spezielle Formen des elektrostatischen Feldes können verschiedene Effekte erzielt werden, wie beispielsweise Zeit<sup>7</sup>- oder Ortsfokussierung<sup>8</sup>. Beide Fokussierungen können dazu benutzt werden, die endliche Ausdehnung der Reaktionszone und die damit verbundene Meßungenauigkeit zu kompensieren. Durch Überlagerung eines magnetischen Feldes können die Flugbahnen der Elektronen zusätzlich beeinflusst und auf den inneren Bereich des Spektrometers beschränkt werden.

Im vorliegenden Fall waren solche Fokussierungen und ein zusätzliches Magnetfeld nicht notwendig. Ein möglichst einfaches Feld erleichtert es sogar, die Komponenten des Erdmagnetfeldes in die spätere Auswertung mit einzubeziehen, da die damit

<sup>7</sup>Durch Verwendung eines parabelförmigen Potentialverlaufs oder dessen Annäherung in Form eines 1:2-Längenverhältnisses zwischen Beschleunigungsstrecke und feldfreier Driftstrecke

<sup>8</sup>Ermöglicht durch Potentialsprünge, die auf die Flugbahnen der Teilchen eine ähnliche Wirkung haben wie Sammel- oder Streulinsen auf Lichtstrahlen.

verbundenen Bewegungsgleichungen in diesem einfachen Fall noch analytisch gelöst werden können. In Abschnitt 5.2 wird darauf genauer eingegangen.

Die Spektrometerplatten sind durch eine Kette von Widerständen verbunden, so daß durch Anlegen einer Potentialdifferenz zwischen den beiden Enden des Spektrometers ein homogenes Feld im Inneren erzeugt wird. Die Feldstärke wurde auf 1,94 V/cm eingestellt. Dieser Wert wurde mit Hilfe der Simulation ermittelt. Das Feld innerhalb des Spektrometers muß sehr homogen sein, da Feldverzerrungen die Abbildungseigenschaften des Spektrometers verschlechtern und damit die Meßgenauigkeit vermindern. Daher müssen Feldeingriffe in den inneren Bereich des Spektrometers vermieden werden. Aus diesem Grund wurden die Abstände zwischen den Elektrodenplatten klein gehalten (5 mm) und die Breite der Kupferplattenränder im Vergleich dazu relativ groß (mind. 16 mm).

Für den Betrieb der Detektoren sind Potentialdifferenzen von einigen 1000 Volt über wenige Millimeter erforderlich. Diese starken Felder wurden vom Innenraum des Spektrometers durch ein feinmaschiges<sup>9</sup> Metallnetz abgeschirmt. Das Gewebe absorbiert ca. 20% der auftreffenden Teilchen. Ein weiterer negativer Effekt besteht darin, daß sich bei jeder einzelnen Masche des Gewebes eine elektrostatische Linse bildet, die die Flugrichtung und -zeit der Teilchen beeinflusst. Die Effekte dieser Linsen wurden mit dem Programm SIMION simuliert.<sup>10</sup>

Die größten Auswirkungen haben diese Mikrolinsen auf die Bahn und die Flugzeit der  $He^+$ -Ionen. Während beispielsweise die Flugzeitänderung für Elektronen unterhalb von 30 ps bleibt, kann der Fehler für die  $He^+$ -Ionen auf einige Nanosekunden anwachsen. Diese Effekte steigen überproportional mit der Höhe des Feldsprunges am Gitter an. Aus diesem Grund wurde die Entfernung zwischen Gitter und  $He^+$ -Detektor auf ca. 10 mm erhöht. Eine zusätzliche Kupferelektrode zwischen dem Gitter und der Detektoroberfläche hilft, das Feld in dieser Region frei von Verzerrungen zu halten.

Nichtleitende Komponenten des Spektrometers können sich im Betrieb elektrostatisch aufladen, da auftreffende Elektronen nicht abfließen können. Deshalb wurden einige Teile des Spektrometers mit einer dünnen Germaniumschicht bedampft. Die Spektrometerspannung wurde durch Aneinanderreihen von Batterien erzeugt, um eventuell elektronikbedingte Spannungsschwankungen auszuschließen.

Gasjet und Photonenstrahl kreuzen sich innerhalb des Spektrometers. Die Flugstrecke innerhalb des Spektrometers beträgt für die Elektronen 3,3 cm und für die  $He^+$ -Ionen 26,35 cm. Eine längere Flugstrecke für die  $He^+$ -Ionen wäre wünschenswert gewesen, um die Flugzeit zu erhöhen und damit die Meßgenauigkeit auf der  $He^+$ -Seite zu verbessern. Die praktischen Nachteile, die sich aus einem längeren Spektrometer und der dafür notwendigen Verlängerung der Hauptkammer in eine Richtung ergeben hätten, sprachen jedoch dagegen.

Das gesamte Spektrometer wurde gegenüber der Hauptkammer auf ein Potential von

---

<sup>9</sup>Die Maschenweite beträgt ca. 0,2 mm.

<sup>10</sup>Eine ausführliche Diskussion zu diesem Thema befindet sich in der Diplomarbeit von Markus Schöffler [71] und in [72].

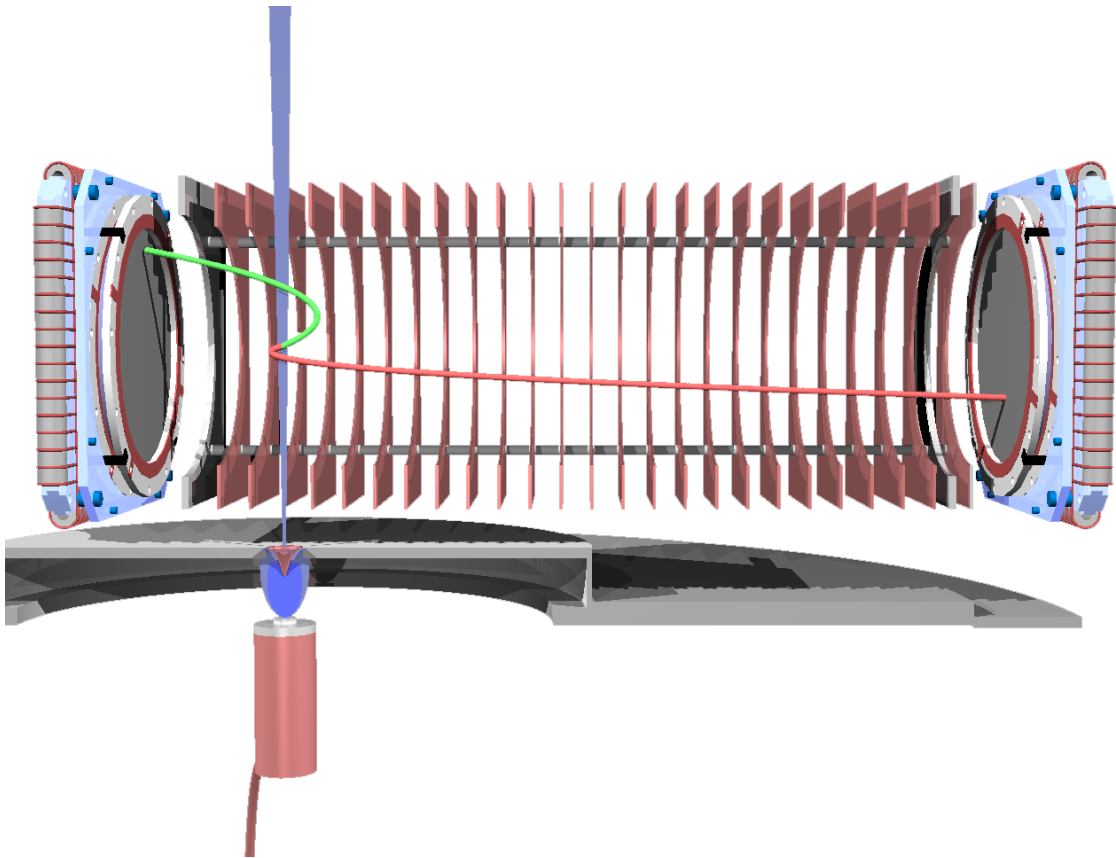


Abbildung 4.7: Innerhalb des Spektrometers sind die Flugbahnen eines Elektrons (linke Seite) und eines  $He^+$ -Ions dargestellt (rechte Seite). Die Auslenkung des  $He^+$ -Ions ist größer dargestellt als es in Realität der Fall wäre. Der Übersicht halber ist nur jede zweite Kupferplatte dargestellt. Der Lichtstrahl ist senkrecht zur Ebene der Zeichnung orientiert.

-300 V abgesenkt, um eventuell in der Hauptkammer vorhandene Elektronen vom Spektrometer fernzuhalten.

Die Form des Spektrometers und des elektrostatischen Feldes wurden mit Hilfe der Computersimulation optimiert. Dabei wurden alle bekannten Fehlereinflüsse berücksichtigt. Um an dieser Stelle Wiederholungen zu vermeiden, wird auf die detaillierte Diskussion in Anhang A verwiesen.

## 4.6 Die Detektoren

Die Detektoren setzen sich aus zwei Komponenten zusammen (Bild 4.8). Der signalverstärkende Teil besteht aus zwei kombinierten Multichannelplates von der Firma Burle mit einem Durchmesser von 80 mm und einer Dicke von ca. 1,33 mm. Die Plates bestehen aus einer Vielzahl von Kanälen ( $\varnothing=25\ \mu\text{m}$ ), die mit dem Auge nicht mehr wahrgenommen werden können. Die Gesamtfläche der Kanalöffnungen beträgt etwas

mehr als 50% der Fläche der Plates. Zwischen den beiden Seiten eines Plates wird eine Potentialdifferenz von ca. 1 kV angelegt. Trifft nun ein Teilchen auf die Oberfläche eines Plates, so werden Sekundärelektronen ausgelöst, die entlang der Kanäle beschleunigt werden und dabei weitere Elektronen aus den Wänden herausschlagen. Die Verstärkung eines Plates alleine reicht für die nachgeschaltete Elektronik noch nicht aus. Daher wird ein zweites Plate zur zusätzlichen Verstärkung verwendet. In einigen Fällen werden sogar drei Plates kombiniert.

Bei diesem Prozeß entsteht eine Elektronenlawine, die aus der hinteren Oberfläche des zweiten Plates austritt und auf den Teil des Detektors trifft, mit dem der Ort bestimmt wird. Dieser Teil heißt Delayline-Anode<sup>11</sup>. Das Delayline-Prinzip beruht auf

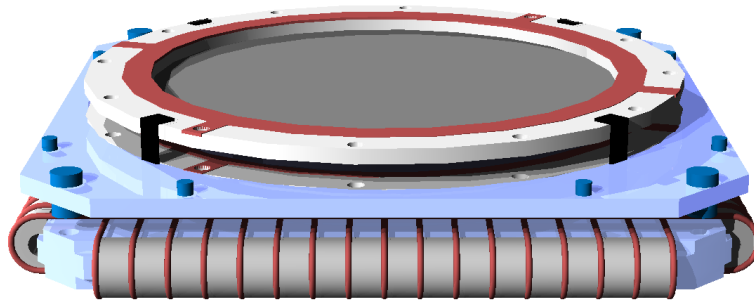


Abbildung 4.8: Der Detektor besteht aus zwei Microchannelplates (graue Flächen), die von 2 Keramikringen zusammengehalten werden, der Halteplatte (Holder) und den beiden Drahtebenen der Anode. Der Übersicht halber sind nur wenige Drahtwicklungen eingezeichnet.

der Tatsache, daß sich elektrische Signale mit einer endlichen Geschwindigkeit entlang eines Drahtes ausbreiten. Ein Draht wird auf einen Keramikrahmen aufgewickelt (Bild 4.9). Wird nun an einem Ort auf dieser Fläche eine elektrische Ladung deponiert, so breiten sich zwei elektrische Signale in entgegengesetzter Richtung entlang des Drahtes aus. Anhand der Laufzeiten der Signale kann der Ursprungsort ermittelt werden. In klassischen Delayline-Anoden werden zwei dieser Drahtebenen kombiniert, um beide Ortsrichtungen auflösen zu können. Ein Signalpuls würde auf einem einfachen Draht sehr bald durch Dispersion zerstört. Aus diesem Grund wird nicht ein Draht, sondern ein Drähtepaar aufgewickelt, um die weitaus bessere Signalleitfähigkeit einer Lecherleitung für hochfrequente Signale auszunutzen.

Für jedes nachgewiesene Teilchen gibt der Detektor fünf Signale aus: Ein Signal wird direkt von den Multichannelplates abgenommen. Es entsteht beim Emittieren der Elektronenlawine. Die anderen vier Signale werden an den vier Enden der Delayline-Anode ausgekoppelt. Diese Signale werden mit entsprechender Elektronik weiterverarbeitet und im Computer aufgezeichnet (Abschnitt 4.8). Mit diesen fünf Signalen steht nun mehr Information zur Verfügung als für die Ortsberechnung notwendig ist, denn im Grunde genommen reicht dazu jeweils ein Signal pro Drahtebene und das Zeitsignal von den Multichannelplates aus. Die zusätzlichen Signale sind vor allem dann von

<sup>11</sup>Hergestellt von der Firma Roentdek.



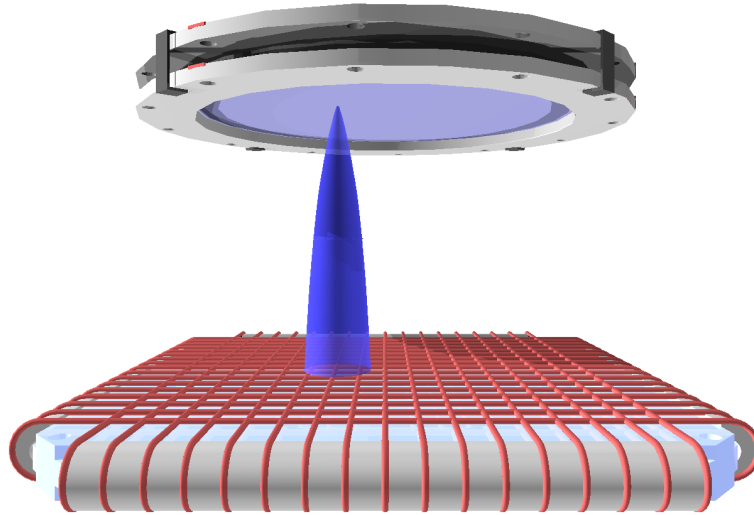


Abbildung 4.9: In den Mikrokanälen der Plates erfolgt die Elektronenvervielfältigung. Am Ende dieses Prozesses wird eine Elektronenwolke ausgeworfen, die auf die Drahtebenen der Anode projiziert wird. Der Abstand zwischen den Multi-Channel-Plates und den Anodendrähten ist hier übertrieben groß wiedergegeben. Er beträgt in Wirklichkeit nur wenige Millimeter. Der Übersicht halber sind nur wenige Drahtwicklungen eingezeichnet.

großem Nutzen, wenn mehrere Teilchen nahezu zeitgleich<sup>12</sup> auf den Detektor auftreffen, was zu Uneindeutigkeiten bei der Zuordnung der Signale zueinander führt. Im vorliegenden Fall werden pro Reaktion nur jeweils ein Elektron und ein  $He^+$ -Ion erzeugt. Daher ist das Auftreffen zweier Teilchen innerhalb einer kurzen Zeitspanne von ca. 100 ns sehr unwahrscheinlich.

Von diesen fünf Signalen werden jeweils die Zeitpunkte  $T_{mcp}, x_1, x_2, y_1, y_2$  gemessen, an denen sie die verarbeitende Elektronik erreichen.

Als Zeitnullpunkt kann der Moment des Photonpulses  $T_{Puls}$  gewählt werden. Der Lichtpuls wird begleitet von einem synchronisierten elektrischen Signal, das vom Synchrotron zur Verfügung gestellt wird.

Die Flugzeit des Teilchens (im folgenden auch TOF genannt für „Time of Flight“) ist gegeben durch

$$T_{TOF} = T_{mcp} - T_{Puls} + T_{const.} \quad (4.4)$$

$T_{const.}$  ist eine durch verschiedene Kabellängen gegebene Konstante, die anhand von Kalibrierungsmessungen ermittelt werden kann<sup>13</sup>. Die Ortskomponenten  $x$  und  $y$  werden berechnet durch

$$\begin{aligned} x &= x_1 - x_2 \\ y &= y_1 - y_2 \end{aligned}$$

Die von den Signalen zurückgelegten Wegstrecken entlang der Drähte ist abhängig vom

<sup>12</sup>innerhalb von ca. 100 ns

<sup>13</sup>siehe Abschnitt „Zeitnullpunkt“ 5.3.3 auf Seite 59

Auftreffort des Teilchens. Die Summe dieser Wegstrecken ist jedoch immer gleich der Gesamtlänge der Drähte. Daraus folgt, daß die Summe der Signallaufzeiten unabhängig davon ist, wo die Elektronenlawine auf der Drahtebene auftritt. Das heißt

$$\begin{aligned}(x_1 - T_{mcp}) + (x_2 - T_{mcp}) &= T_{sum_x} \\ (y_1 - T_{mcp}) + (y_2 - T_{mcp}) &= T_{sum_y}\end{aligned}$$

Die Zeitsummen  $T_{sum_x}$  und  $T_{sum_y}$  der beiden Drahtebenen sind Konstanten. Sie ergeben sich aus der Gesamtlänge des aufgewickelten Drähtepaares einer Ebene und den Kabellängen innerhalb der verarbeitenden Elektronik.  $T_{sum_x}$  und  $T_{sum_y}$  unterscheiden sich leicht, da die äußere Ebene etwas größer ist, um die innere umschließen zu können (Bild 4.9). Die oben angegebenen Beziehungen ermöglichen es, fehlende Zeitsignale zu rekonstruieren bzw. Uneindeutigkeiten im Fall von gleichzeitig auftreffenden Teilchen aufzulösen.

Die Nachweiseffizienz der Detektoren liegt nicht bei 100%. Sie ist abhängig von der Art der nachzuweisenden Teilchen und von deren kinetischer Energie. Die Elektronen und  $He^+$ -Ionen besitzen nach Verlassen des Spektrometers Energien von wenigen eV. Das ist für den Nachweis mit den hier beschriebenen Detektoren zu gering. Die Elektronen und  $He^+$ -Ionen müssen daher nachbeschleunigt werden. Für Elektronen reicht eine Erhöhung der kinetischen Energie auf ca. 300 eV aus, bei  $He^+$ -Ionen sind dagegen bereits mindestens 2000 eV notwendig ([66] Seite 68). Die Nachbeschleunigungsspannungen werden zwischen den Abschlußgittern des Spektrometers und den vorderen Multichannelplates angelegt (Bild 4.10).

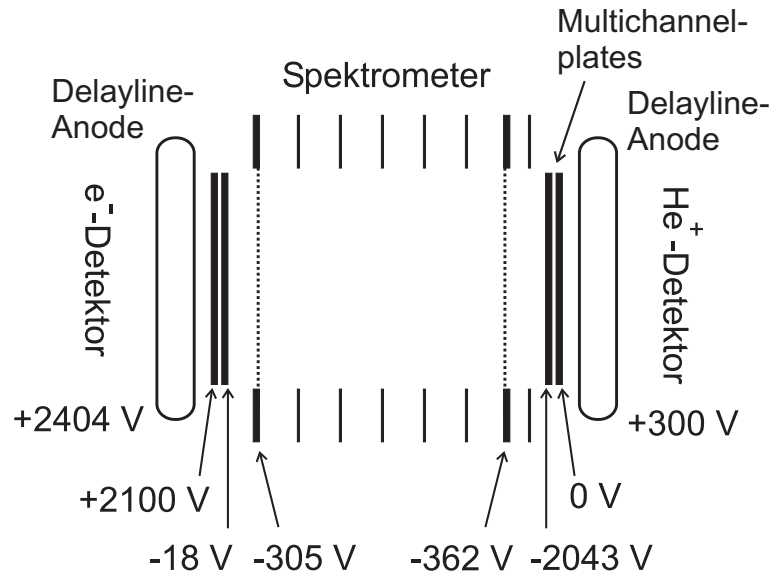


Abbildung 4.10: Die angelegten Spannungen relativ zur Erde. Die Abschlußgitter des Spektrometers sind durch gepunktete Linien gekennzeichnet.

## 4.7 Der Meßplatz am Synchrotron BessyII

Der primäre Lichtstrahl wird innerhalb des Synchrotronrings im Undulator erzeugt und tangential vom Ring entlang des Strahlrohrs (engl. „Beamline“) weggeführt. Innerhalb des Strahlrohrs wird er durch Blenden und Spiegel geformt und fokussiert. Wichtigstes Element des Strahlrohrs ist der Monochromator, der aus dem breiten Frequenzspektrum des Primärstrahls den gewünschten Frequenzbereich herausfiltert. Für eine umfangreichere Beschreibung des Synchrotrons und seiner Komponenten wird auf Anhang B verwiesen.

Strahlrohre unterscheiden sich vor allem im zugänglichen Frequenzbereich, in den Strahlintensitäten und der erreichbaren Energieauflösung  $\Delta E/E$ . Das Strahlrohr U125/1-PGM am Bessy II in Berlin bietet ideale Voraussetzungen für das hier beschriebene Experiment. Das Flußmaximum liegt bei einer Photonenenergie von ca. 100 eV und die maximale Energieauflösung beträgt ca. 1:90000. Der Fokus des Lichtstrahls befindet sich ca. 1,20 m entfernt vom letzten Element des Strahlrohrs und ist mit 0,1 mm (FWHM hor.)  $\times$  0,04 mm (FWHM vert.) sehr klein. Fast alle Komponenten des Strahlrohrs können über einen Computer kontrolliert werden. Zudem kann dieser Rechner auf einige Meßgeräte zugreifen, so daß einfache Diagnosemessungen - beispielsweise das Auftragen des Photonenflusses als Funktion der Photonenenergie - durchgeführt werden können.

Über einen Drucksensor wird der Druck hinter dem Ausgangsventil des Strahlrohrs überwacht. Wird an dieser Stelle ein Druck von unter  $1 \cdot 10^{-8}$  mbar gemessen, so gibt das System das Ventil frei und der Photonenstrahl kann zum Experiment geleitet werden.

Das Licht, das an dieser Beamline zur Verfügung steht, ist linear polarisiert. Der Polarisationsvektor ist horizontal orientiert. Ein wichtiger Wert ist der Reinheitsgrad der Polarisation. Er wird durch den Stokesparameter  $S_1$  quantitativ erfaßt.<sup>14</sup> Eine Kalibrierungsmessung (Abb. 5.10, Seite 64) mit dem Ergebnis  $S_1 \approx 1$  hat gezeigt, daß innerhalb der Meßgenauigkeit der Apparatur kein Anteil von vertikaler Polarisation nachgewiesen werden kann.

---

<sup>14</sup>siehe Abschnitt 2.4 auf Seite 20.

## 4.8 Signalverarbeitung und Monochromatorsteuerung

Von den Detektoren werden analoge Signale ausgegeben. Der Informationsgehalt besteht in der Zeit, zu der das entsprechende Signal ausgegeben wurde. Anhand dieser Zeitinformation lassen sich die Flugzeiten der Teilchen und ihre Positionen auf den Detektoren berechnen. Bevor die Signale weiterverarbeitet werden können, müssen sie verstärkt werden. Die Bandbreite der Verstärker muß groß sein, da die Anstiegszeit der Signale nur wenige Nanosekunden beträgt.

Die Signalleitungen der Delayline-Anode bestehen aus einem Drähtepaar - einer Lecherleitung (Seite 44). Die dazugehörigen Differenzverstärker verstärken nur die Differenz der Signale zwischen diesen Drähten. Das hat den Vorteil, daß von außen aufgeprägte Störungen nicht mitverstärkt werden, da sie sich auf beide Drähte gleichmäßig verteilen.

Nach der Verstärkung werden die Signale in den Constant-Fraction-Diskriminatoren in genormte NIM-Signale umgewandelt. Dieser Schritt ist notwendig, da die weiterverarbeitende Elektronik mit NIM-Signalen arbeitet. Constant-Fraction-Diskriminatoren zeichnen sich dadurch aus, daß sie bei der Konvertierung des Signals die Zeitinformation exakt beibehalten, selbst wenn die Amplituden der Eingangssignale nicht konstant sind. Dem gegenüber würde z.B. ein Leading-Edge-Diskriminator, der immer beim Überschreiten einer gewissen Schwelle ein Signal ausgibt, weniger präzise arbeiten, da die Schwellenhöhe früher oder später erreicht wird, je nachdem ob das Eingangssignal hoch oder niedrig war.

Die Signale werden nun in den Time-to-Digital-Konverter (TDC) geleitet. Der TDC mißt in jedem Eingangskanal, wann ein Signal eingetroffen ist und speichert diesen Wert in einem Zwischenspeicher. Die Zeitauflösung des hier verwendeten TDCs liegt bei 0,5 ns pro Kanal. Dem TDC kann durch ein externes Signal - dem Trigger - mitgeteilt werden, daß er seine Daten an den Computer weiterleiten soll. Das ermöglicht den Einsatz einer Koinzidenzschaltung, d.h. einer Logikschaltung, mit deren Hilfe schnell entschieden werden kann, ob ein Ereignis aufgenommen werden soll oder nicht. Der Photonenstrahl kann beispielsweise Moleküle aus dem Restgas ionisieren, oder gestreute Photonen können Elektronen aus Oberflächen herausschlagen. Solche Ereignisse werden ebenfalls von den Detektoren registriert. Sie unterscheiden sich jedoch von echten  $\gamma + He$ -Reaktionen durch die absoluten Flugzeiten der Teilchen und den relativen Flugzeitunterschieden zwischen ihnen. Die Koinzidenzschaltung überprüft, ob die beiden Zeitsignale der Detektoren und das zum Lichtpuls synchrone Bunchmarker-Signal innerhalb gewisser Bereiche liegen (Abb. 4.12) und gibt die Aufnahme über das Triggersignal frei.

In Bild 4.11 ist die Schaltung dargestellt. Der zeitliche Ablauf innerhalb der Koinzidenzschaltung ist in Abb. 4.12 skizziert: Wird ein Elektron auf dem Elektronen-Detektor nachgewiesen, so wird ein Zeitfenster (engl. Gate) geöffnet (Linie b). Das Bunchmarkersignal wird so weit verzögert, daß es in das Zeitfenster fällt. Ist das der Fall, so wird ein neues Signal ausgegeben.

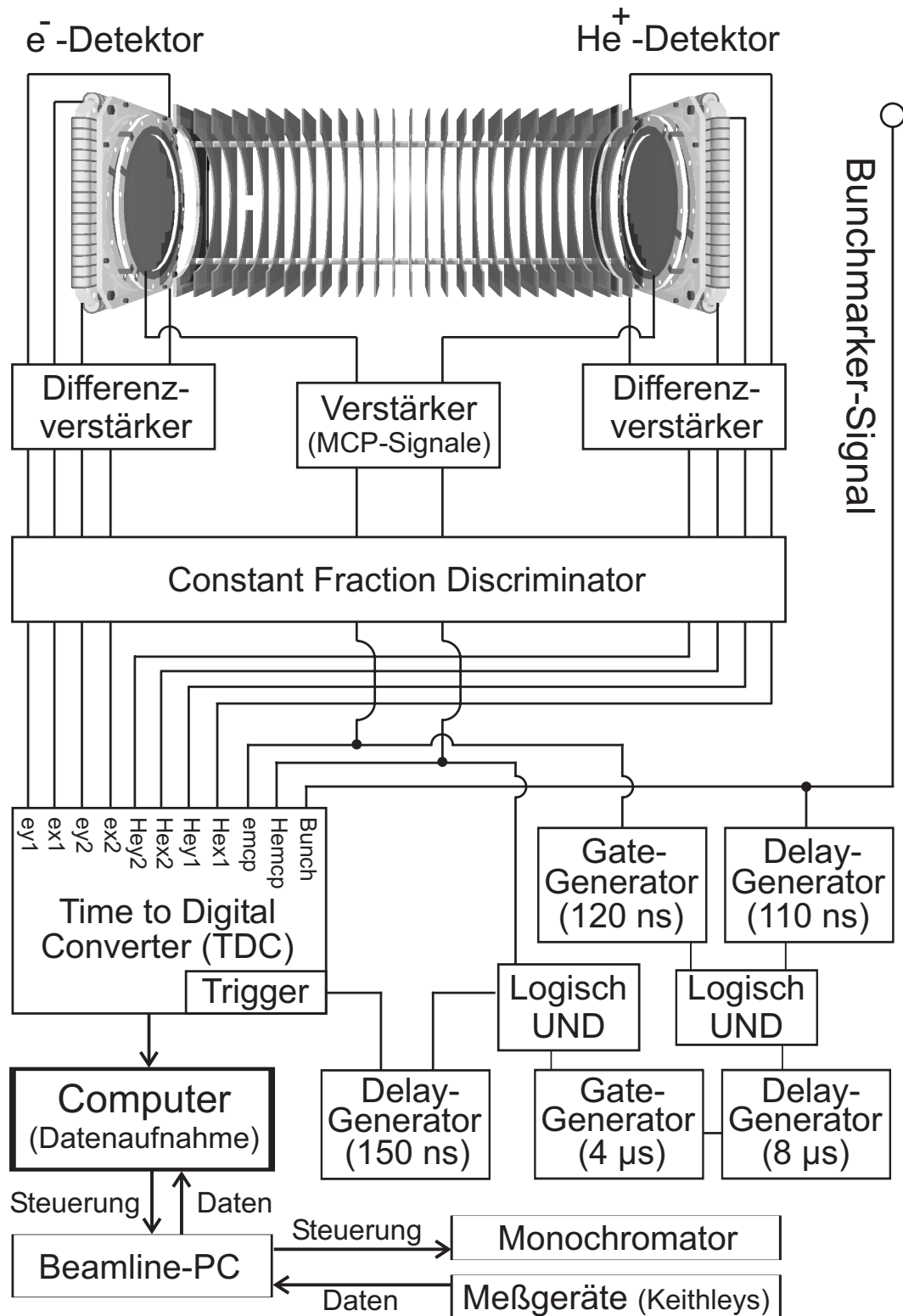


Abbildung 4.11: Die Verschaltung der Datenaufnahme

Mit diesem Teil der Schaltung wird eine Bedingung auf die Flugzeiten der Elektronen gelegt, d.h. es werden nur Elektronen beachtet, die innerhalb von 100 ns nach einem Lichtpuls eintreffen. Das nun erzeugte Signal wird ca.  $8\mu\text{s}$  verzögert und öffnet dann ein  $4\mu\text{s}$  breites Zeitfenster (Linie d), in das das Zeitsignal vom  $\text{He}^+$ -Detektor fallen muß (Linie e).

Die Flugzeiten der  $\text{He}^+$ -Ionen betragen ca.  $10\mu\text{s}$ , d.h. sie liegen in der Mitte dieses Zeitfensters. Wird innerhalb des Zeitfensters ein Teilchen auf dem  $\text{He}^+$ -Detektor nachgewiesen, so wird das Triggersignal an den TDC geleitet. Das Triggersignal muß etwas verzögert werden, damit auch die später eintreffenden Anodensignale des  $\text{He}^+$ -Detektors vom TDC aufgezeichnet werden können.

Ein mögliches Problem stellt die maximale Aufnahmezeit des Systems dar. Bis vor kurzem war die maximale Auslastung bei ca. 1000 Hz erreicht. Durch Arbeiten von Till Jahnke konnte dieser Wert auf ca. 30 kHz gesteigert werden. Diese Verbesserung kam dem Experiment direkt zugute, da hier praktisch ohne Totzeit mit einer durchschnittlichen Rate von ca. 4 kHz aufgenommen wurde.

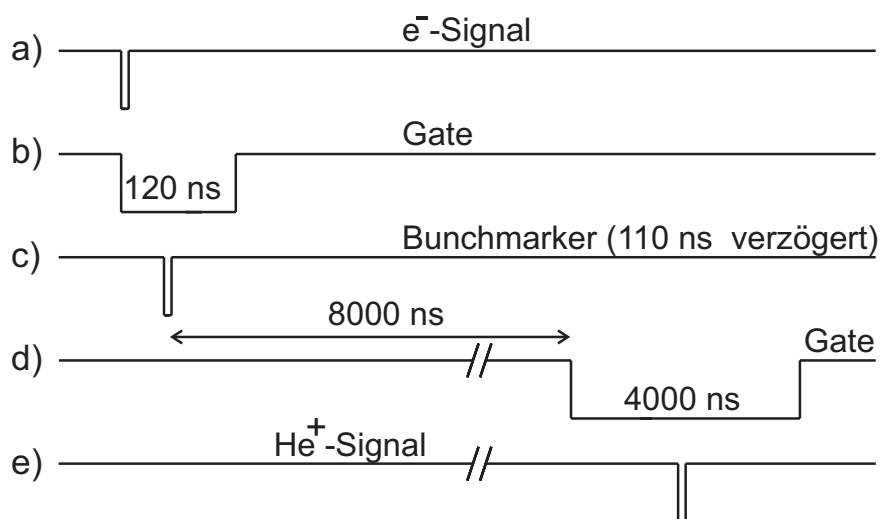


Abbildung 4.12: Der zeitliche Ablauf der Koinzidenzschaltung. Durch ein Signal auf dem Elektronendetektor (Linie a) wird ein Zeitfenster („Gate“) geöffnet (Linie b). Es wird nun überprüft, ob das um ca. 110 ns verzögerte Bunchmarkersignal (Linie c) innerhalb dieses Gates liegt. Ist das der Fall, so wird ein weiteres Gate geöffnet (Linie d). Dieses Gate wird allerdings zuvor um  $8\mu\text{s}$  verzögert, um der langen Flugzeit der  $\text{He}^+$ -Ionen (ca.  $10\mu\text{s}$ ) Rechnung zu tragen. Wird ein  $\text{He}^+$ -Ion innerhalb dieses Zeitfensters nachgewiesen, so wird das Triggersignal ausgelöst, d.h. die Datenaufnahme wird gestartet. Dieses Signal muß um ca. 150 ns verzögert werden, damit auch die später eintreffenden vier Signale von der Delayline-Anode des  $\text{He}^+$ -Detektors vom TDC erfasst werden können.

## Steuerung des Monochromators

Während des Experiments muß die Einstellung des Monochromators<sup>15</sup> oft geändert werden, um eine andere Photonenenergie einzustellen. Das muß normalerweise manuell am Beamlinerechner geschehen. Um den Vorgang zu automatisieren, wurde speziell für diese Messung ein Programm geschrieben, das es dem Meßrechner erlaubt, über das Internetprotokoll TCP/IP mit dem Beamlinerechner zu kommunizieren. Daraus ergeben sich mehrere Vorteile. Zum einen kann der Meßrechner anhand der eingegangenen Datenmenge selbst entscheiden, ob eine neue Energie angefahren wird. Zum anderen können nun auch Meßgeräte, die an den Beamlinerechner angeschlossen sind, vom Meßrechner ausgelesen werden.

Das Programm fragte zu jeder Sekunde verschiedene Meßwerte wie beispielsweise die Detektorraten und die Stärke des Photonenflusses ab und schrieb sie in eine Datei. Dieser Datenstrom wurde mit dem des TDC synchronisiert, indem die Systemzeit des Computers in beiden Dateien mit einer Genauigkeit von ca. einer Millisekunde mitgeschrieben wurde.

---

<sup>15</sup>siehe Anhang B auf Seite 107

# Kapitel 5

## Datenauswertung

Die Daten wurden in Form von großen Listendateien im Computer gespeichert. Für jede einzelne Reaktion wurden die Flugzeiten und Endpositionen auf den Detektoren aufgezeichnet. Aus diesen Informationen können die ursprünglichen Impulse der Teilchen berechnet werden, da das Feld innerhalb des Spektrometers bekannt ist. Mit diesen Daten kann das gesamte Experiment Reaktion für Reaktion im Computer wiederholt werden.

Für die Auswertung der Daten wurde ein Programm geschrieben, das die Datenlisten (ca. 300 Gb) einliest und für jede einzelne Reaktion den Impuls des Elektrons und des  $He^+$ -Ions berechnet (Abschnitt 5.2). Des weiteren überprüft das Programm, ob das  $e^-/He^+$ -Paar wirklich aus derselben Reaktion stammt. Durch verschiedene Störeffekte werden während des Experiments viele Elektronen erzeugt, die nicht aus einer Reaktion zwischen einem Photon und einem Heliumatom stammen. Diese Ereignisse müssen erkannt und herausgefiltert werden (Abschnitt 5.4).

Aus den Impulskomponenten wird die kinetische Energie des Elektrons berechnet. Anhand der am Monochromator eingestellten Energie der Photonen und der kinetischen Energie des emittierten Elektrons kann auf die Hauptquantenzahl  $N$  des  $He^+$ -Ions rückgeschlossen werden. Die Informationen werden in Form von verschiedenen Histogrammen gesammelt.

Die Kalibrierung der Detektoren und die genaue Kenntnis der Felder innerhalb des Spektrometers sind wichtig für die Genauigkeit der Messung. Diese Punkte werden in den folgenden Abschnitten besprochen.

### 5.1 Das Koordinatensystem

Für die folgenden Abschnitte ist es wichtig, ein Koordinatensystem und einige Begriffe zu definieren. Der Koordinatenursprung liegt im Mittelpunkt der Reaktionszone, d.h. dort, wo sich Photonenstrahl und Gasjet kreuzen. Die X-Achse verläuft entlang des Photonenstrahls in Richtung Beamdump. Die Y-Achse verläuft entlang des Gas-



jets nach oben, und die Z-Achse verläuft vom  $He^+$ -Detektor zum  $e^-$ -Detektor. Alle Gleichungen in den folgenden Abschnitten gelten in diesem Koordinatensystem.

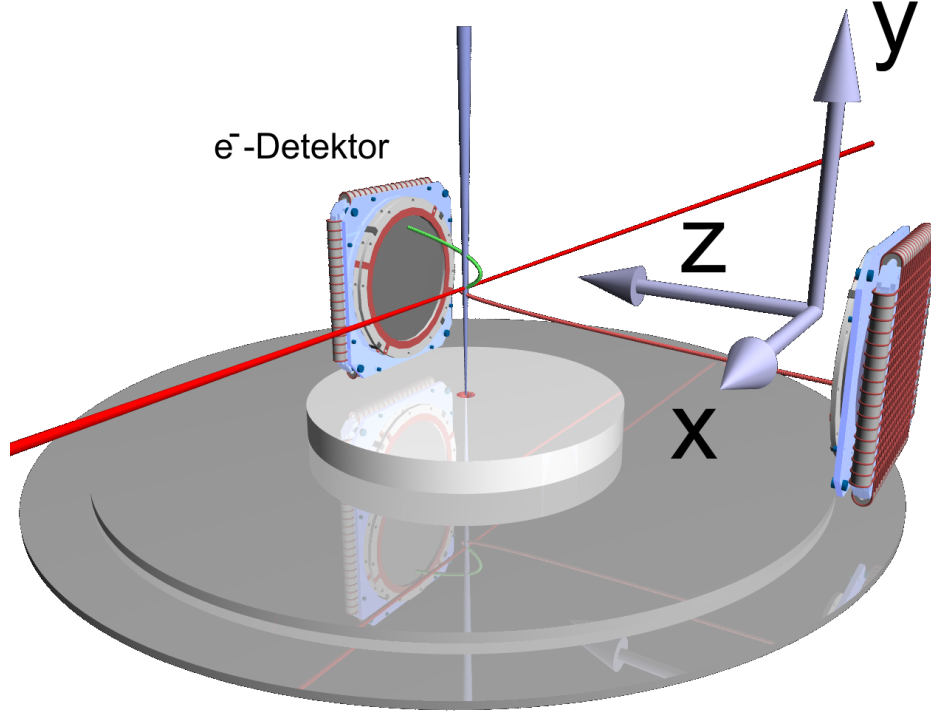


Abbildung 5.1: Der Ursprung des Koordinatensystems liegt dort, wo sich Photonenstrahl und Gasjet kreuzen.  $\vec{z}$  zeigt in Richtung des  $e^-$ -Detektors und  $\vec{x}$  entspricht der Ausbreitungsrichtung der Photonen.

## 5.2 Impulsberechnung im Erdmagnetfeld

Für den einfachsten Fall, daß nur ein homogenes elektrostatisches Feld  $\vec{E}$  entlang der Spektrometerachse (Z-Achse) vorliegt, ist die Berechnung der Impulskomponenten eines Elektrons sehr einfach:

$$P_{ex} = m_e \frac{x_e}{T_e} \quad (5.1)$$

$$P_{ey} = m_e \frac{y_e}{T_e} \quad (5.2)$$

$$P_{ez} = m_e \frac{z_e}{T_e} - m_e \frac{1}{2} a T_e \quad (5.3)$$

wobei  $T_e$  die Flugzeit des Elektrons,  $x_e$  und  $y_e$  die Endpositionen auf dem Detektor,  $z_e$  die Flugstrecke<sup>1</sup> in Richtung zum Detektor,  $m_e$  die Masse des Teilchens und

<sup>1</sup>Die Flugstrecke in z-Richtung ist konstant:  $z_e = -3,3$  cm.

$a = Eq/m_e$  seine Beschleunigung im Feld  $\vec{E}$  ist<sup>2</sup>. Die Gleichungen gelten in dieser Form auch für das  $He^+$ -Ion mit den Größen  $x_{He}$ ,  $y_{He}$ ,  $z_{He}=26,35$  cm,  $m_{He}$  und  $T_{He}$ . Diese Berechnung ist nur dann exakt, wenn alle Teilchen am gleichen Ort ( $x_0 = 0$ ,  $y_0 = 0$ ,  $z_0 = 0$ ) entstehen. Die Reaktionszone, d.h. der Bereich, wo sich Photonenstrahl und Gasjet kreuzen, hat aber eine Ausdehnung von ca.  $3 \text{ mm} \times 0,04 \text{ mm} \times 0,1 \text{ mm}$ . Die Genauigkeit der Impulsberechnung ist dadurch zunächst beschränkt. An dieser Stelle kann ausgenutzt werden, daß zwischen den beiden Teilchen Impulserhaltung gilt. Dadurch ist es möglich, aus den sechs Meßgrößen - vier Ortsinformationen und zwei Flugzeiten - drei Impulskomponenten und die drei Ortskomponenten des Produktionsortes zu ermitteln. Diese Korrektur ist jedoch limitiert durch die Meßgenauigkeit des  $He^+$ -Detektors. Eine signifikante Verbesserung wird daher nur durch eine Korrektur in X-Richtung erreicht, da hier aufgrund der großen Targetausdehnung von über 3 mm der größte Fehlereinfluß besteht.

Zunächst wird durch Gl. 5.1 der noch ungenaue Impuls des Elektrons in X-Richtung berechnet.

$$P_{ex} = m_e \frac{x_e}{T_e}$$

Dann wird der Ort der Entstehung  $x_0$  angenähert:

$$x_{He} = x_0 - \frac{P_{ex}}{m_{He}} T_{He} \quad \Rightarrow \quad x_0 = x_{He} + \frac{P_{ex}}{m_{He}} T_{He}$$

Im nächsten Schritt wird diese Information bei der erneuten Berechnung des Impulses berücksichtigt:

$$P_{ex} = m_e \frac{x_e - x_0}{T_e}$$

Die Energieauflösung des Systems wird durch diesen Schritt im Mittel um ca. 30% verbessert. Diese Form der Korrektur ist nicht exakt, sondern stellt nur eine Näherung dar. Für den oben beschriebenen einfachen Fall, in dem nur ein homogenes elektrostatisches Feld vorhanden ist, könnte der Impuls direkt aus dem Abstand der beiden Teilchen berechnet werden:

$$x_e - x_{He} = \left( \frac{P_{ex}}{m_e} T_e - \frac{P_{ex}}{m_{He}} T_{He} \right) \quad \Rightarrow \quad P_{ex} = \Delta x \left( \frac{1}{m_e} T_e - \frac{1}{m_{He}} T_{He} \right)^{-1}$$

Während der Messung war aber das Erdmagnetfeld dem elektrostatischen Feld des Spektrometers überlagert. Das Erdmagnetfeld beeinflusst Elektronen und  $He^+$ -Ionen unterschiedlich, so daß diese Art der exakten Impulsberechnung nicht angewandt werden kann. Das Erdmagnetfeld läßt sich nur dann auf eine einfache Art und Weise in die Impulsberechnung einbeziehen, wenn die Achse des Magnetfeldes parallel zum elektrischen Feldvektor verläuft. Das ist beim Erdmagnetfeld nicht der Fall. Die Bewegungsgleichungen nehmen durch die Berücksichtigung der Lorentzkraft eine kompliziertere Form an. Es müssen daher drei gekoppelte Differentialgleichungen gelöst werden:

$$\ddot{x}_e = \frac{-e}{m_e} \left( \dot{z}_e B_y - \dot{y}_e B_z \right)$$

---

<sup>2</sup>Der Feldvektor soll zum  $He^+$ -Detektor zeigen, d.h. in die Richtung, in die positiv geladene Teilchen beschleunigt werden.

$$\begin{aligned}\ddot{y}_e &= \frac{-e}{m_e} (\dot{x}_e B_z - \dot{z}_e B_x) \\ \ddot{z}_e &= \frac{-e}{m_e} (\dot{y}_e B_x - \dot{x}_e B_y + E)\end{aligned}$$

Durch eine geeignete Koordinatentransformation können die Gleichungen teilweise voneinander entkoppelt werden. Das neue Koordinatensystem ( $'$ ) ist so orientiert, daß die neue  $z'$ -Achse parallel zum Magnetfeld verläuft und der  $\vec{E}$ -Feldvektor in der  $x' \times z'$ -Ebene liegt (Bild 5.2). D.h. die Einheitsvektoren  $\vec{e}_{x'}$ ,  $\vec{e}_{y'}$  und  $\vec{e}_{z'}$  des neuen Koordinatensystems lauten

$$\vec{e}_{y'} = \frac{\vec{B} \times \vec{E}}{|\vec{B} \times \vec{E}|} \quad \vec{e}_{z'} = \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|} \quad \vec{e}_{x'} = \vec{e}_{z'} \times \vec{e}_{y'}$$

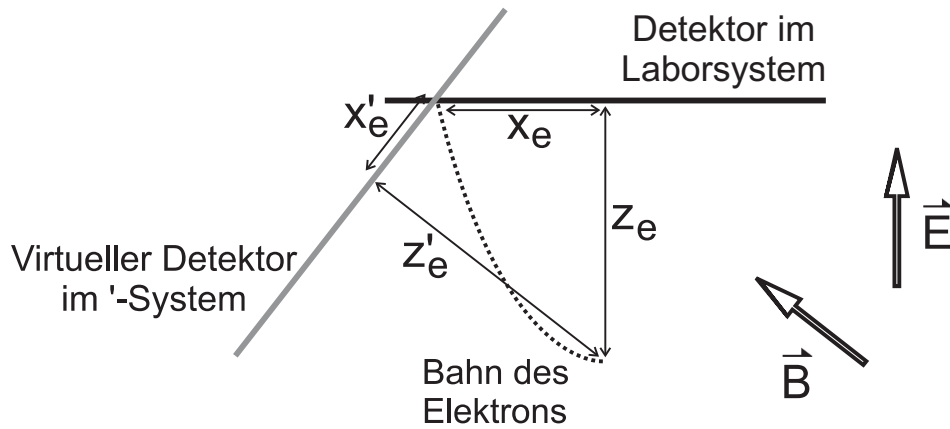


Abbildung 5.2: Die Bahn des Elektrons im Laborsystem  $(x_e, y_e, z_e)$  und im gedrehten System  $(x'_e, y'_e, z'_e)$ . Im 'System verläuft die  $z'$ -Achse parallel zum Magnetfeld.

Daraus kann die Transformationsmatrix  $\hat{R}$  gebildet werden, die das Laborsystem in das neue Koordinatensystem überführt. Die Differentialgleichungen vereinfachen sich im neuen System zu

$$\ddot{x}'_e = \frac{-e}{m_e} (-\dot{y}'_e B_{z'} + E_{x'}) = \dot{y}'_e \omega - \frac{e}{m} E_{x'} \quad (5.4)$$

$$\ddot{y}'_e = \frac{-e}{m_e} (\dot{x}'_e B_{z'}) = -\dot{x}'_e \omega \quad (5.5)$$

$$\ddot{z}'_e = \frac{-e}{m_e} E_{z'} \quad (5.6)$$

da  $E_{y'} = 0$  und  $B_{x'} = B_{y'} = 0$  ist und  $\omega = -e B_{z'}/m_e$  gesetzt werden kann. Für die folgenden Rechnungen soll  $B_z > 0$  gelten.

Die Lösung von Gleichung 5.6 ist einfach und lautet analog zu Gl. 5.3:

$$P_{ez'} = m_e \frac{z'_e}{T} - m_e \frac{-e E_{z'}}{2 m_e} T_e \quad (5.7)$$

Die Entfernung  $z_e$  zwischen Reaktionszone und Detektoroberfläche ist im Laborsystem eine Konstante. Das ist im neuen Koordinatensystem nicht mehr der Fall, weil bei der Koordinatentransformation Anteile von  $x_e$  und  $y_e$  in  $z'_e$  eingehen, die je nach Auftreffort verschieden sind (Bild 5.2).

Gleichung 5.4 integriert und in Gl.5.5 eingesetzt ergibt

$$\ddot{y}'_e(t) = -\omega \left( y'_e \omega - \frac{e}{m} E_{x'} t + A \omega \right) = -\omega^2 \left( y'_e - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t + A \right)$$

mit der noch zu bestimmenden Integrationskonstanten  $A$ . Umformen nach  $y'_e$  führt zu

$$y'_e = \frac{\ddot{y}'_e}{-\omega^2} + \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t - A \quad (5.8)$$

Diese einfache Differentialgleichung wird gelöst durch

$$y'_e(t) = R \sin(\varphi + \omega t) + \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t - A \quad (5.9)$$

mit den beiden neuen Konstanten  $R$  und  $\varphi$ . Das ist bereits die gesuchte Bewegungsgleichung für  $y'_e(t)$ . Zur Zeit  $t = 0$  muß  $y'_e = 0$  sein. Dadurch ist  $A$  festgelegt auf

$$A = R \sin(\varphi)$$

Die Bewegungsgleichung für  $x'_e(t)$  erhält man durch Einsetzen der Ableitung von Gl. 5.9 in Gl. 5.5 und anschließendem Integrieren:

$$x'_e(t) = -R \cos(\varphi + \omega t) + C \quad (5.10)$$

mit  $C = R \cos(\varphi)$  wegen  $x'_e(t=0) \stackrel{!}{=} 0$ . Jetzt müssen noch  $R$  und  $\varphi$  bestimmt werden. Aus Gl. 5.9 und 5.10 folgt unter Anwendung der Additionstheoreme für Winkelfunktionen:

$$\begin{aligned} \left( y'_e(t) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t \right)^2 + \left( x'_e(t) \right)^2 &= 2 R^2 \left( 1 - \sin(\varphi + \omega t) \sin(\varphi) \right. \\ &\quad \left. - \cos(\varphi + \omega t) \cos(\varphi) \right) \\ &= 2 R^2 (1 - \cos(\omega t)) \\ &= 4 R^2 \sin^2 \left( \frac{\omega t}{2} \right) \\ \implies R &= \frac{\sqrt{\left( y'_e(t) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t \right)^2 + \left( x'_e(t) \right)^2}}{2 \sin \left( \frac{\omega t}{2} \right)} \quad (5.11) \end{aligned}$$

Nun muß die letzte Konstante  $\varphi$  bestimmt werden. Die Bahngleichungen Gl. 5.9 und 5.10 stellen eine Zykloide in Parameterform dar. Nach Gl. 5.9 bewegt sich der Mittelpunkt des Zykloidenkreises mit der Geschwindigkeit  $\frac{E_{x'}}{B_{z'}}$ .  $\varphi$  läßt sich anhand von Bild 5.3 geometrisch ermitteln:

$$\varphi = \arctan \left( \frac{y'_e(t) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} t}{x'_e(t)} \right) - \frac{\pi - \omega t}{2}$$

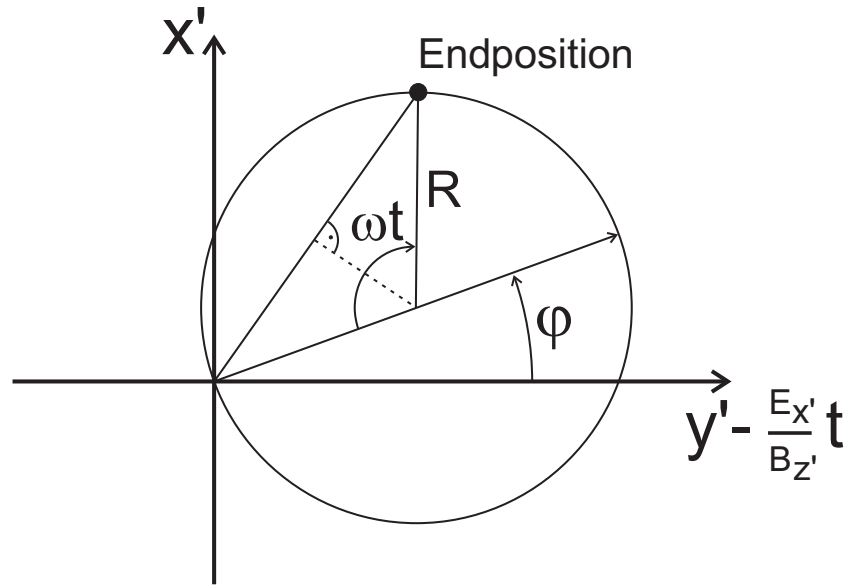


Abbildung 5.3: Im  $'$ -System besteht die Bahn des Elektrons aus einer beschleunigten Bewegung entlang der  $\vec{z}'$ -Richtung und einer Kreisbahn in der  $\vec{x}' \times \vec{y}'$ -Ebene, deren Kreismittelpunkt sich mit der konstanten Geschwindigkeit  $E_{x'}/B_{z'}$  entlang  $\vec{y}'$  bewegt.

Nach Differenzieren der Bahngleichungen Gl. 5.9 und 5.10 können die Komponenten der Anfangsimpulse des Elektrons zum Zeitpunkt  $t=0$  berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 P_{ex'} &= m_e \dot{x}'_e = m_e R \omega \sin(\varphi) \\
 P_{ey'} &= m_e \dot{y}'_e = m_e R \omega \cos(\varphi) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} \\
 \text{und Gl. 5.7: } P_{ez'} &= m_e \frac{z'_e}{T} - m_e \frac{-e E_{z'}}{2 m_e} T_e \\
 \text{mit Gl. 5.11: } R &= \frac{\sqrt{\left(y'_e(T_e) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} T_e\right)^2 + \left(x'(T_e)\right)^2}}{2 \sin\left(\frac{\omega T_e}{2}\right)} \\
 \varphi &= \arctan\left(\frac{y'_e(T_e) - \frac{E_{x'}}{B_{z'}} T_e}{x'_e(t)}\right) - \frac{\pi - \omega T_e}{2}
 \end{aligned}$$

wobei  $T_e$  die Gesamtflugzeit des Elektrons ist. Die Impulskomponenten werden nun vom  $(x', y', z')$ -System ins Laborsystem rücktransformiert. Damit ist die Berechnung des Impulses  $\vec{P}_e$  abgeschlossen.

Diese Schritte, d.h. die Transformation  $(x_e, y_e, z_e) \rightarrow (x'_e, y'_e, z'_e)$ , die anschließende Berechnung der Impulskomponenten  $(P_{ex'}, P_{ey'}, P_{ez'})$  und deren Rücktransformation  $(P_{ex'}, P_{ey'}, P_{ez'}) \rightarrow (P_{ex}, P_{ey}, P_{ez})$  werden innerhalb des Analyseprogramms für jede einzelne Reaktion durchgeführt.

## 5.3 Kalibrierung

Alle Größen, die in die Berechnung der Impulskomponenten eingehen, müssen möglichst genau bekannt sein. Dazu gehören die genauen Abmessungen des Spektrometers, die Stärke des Spektrometerfeldes, die drei Raumkomponenten des Erdmagnetfeldes innerhalb des Spektrometers, die Kalibrierung der Detektoren, ihre Position relativ zur Reaktionszone und der Zeitnullpunkt - d.h. die Zeitdifferenz zwischen den Lichtpulsen und den dazugehörigen Bunchmarkersignalen.

Zum Zweck der Kalibrierung des Systems wurden spezielle Kalibrierungsmessungen bei Photonenenergien zwischen  $E_\gamma = 24,58$  eV und  $E_\gamma = 26,6$  eV durchgeführt. 24,58 eV ist die Bindungsenergie des ersten Elektrons, d.h. die niedrigste Energie, mit der Helium einfach ionisiert werden kann. Diese Energieschwelle kann sehr gut identifiziert werden, weil die Reaktionsrate beim Passieren des Schwellenwertes sprunghaft von Null auf einen hohen Wert ansteigt. Die Schärfe dieser Stufe wird allein durch die Energieauflösung des Monochromators bestimmt, die bei 24,58 eV besser als 1 meV ist. Bei dieser Einstellung werden Elektronen mit einer kinetischen Energie um 0 eV frei. Mit Hilfe dieser Daten können die Ortsnullpunkte der Detektoren und der Zeitnullpunkt der Flugzeiten ermittelt werden.

Wird die Photonenenergie  $E_\gamma$  auf einen Wert oberhalb von 24,58 eV eingestellt, so werden Elektronen mit exakt definierter Energie  $E_{e^-} = E_\gamma - 24,58$  eV produziert. Mit Hilfe dieser Messungen werden alle notwendigen Größen bestimmt.

### 5.3.1 Kriterien der Kalibrierung

Das System ist richtig kalibriert, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. Die berechneten Impulse von Elektronen, die in Wirklichkeit eine kinetische Energie von 0 eV haben, müssen um  $\vec{P}_{e^-} = 0$  liegen. Das ist beispielsweise nicht der Fall, wenn der Ortsnullpunkt des Elektron-Detektors oder der Zeitnullpunkt der Flugzeitmessung falsch eingestellt sind.
2. Da der Polarisationsvektor der Synchrotronstrahlung parallel zur Spektrometerachse verläuft, muß die Form der Impulsverteilung der Elektronen dementsprechend spiegelsymmetrisch sein.
3. Der Impulsübertrag aus dem absorbierten Photon ist vernachlässigbar gering<sup>3</sup>. Deshalb muß die Impulsverteilung rotationssymmetrisch um den Polarisationsvektor der Photonen - d.h. um die Spektrometerachse - sein.
4. Die gemessene kinetische Energie der Elektronen muß mit der wahren Energie  $E_{e^-} = E_\gamma - 24,58$  eV übereinstimmen.

---

<sup>3</sup>Der Impuls des Photons geht im Verhältnis  $m_{He}/m_e$  auf das  $He^+$ -Ion über [70]. Der Einfluß auf das Elektron ist daher vernachlässigbar. Siehe auch Fußnote auf Seite 68

### 5.3.2 Ortsnullpunkte

Die Positionen der Detektoren relativ zur Reaktionszone sind zunächst nicht genau bekannt. Das liegt an verschiedenen Gründen wie etwa den Fertigungstoleranzen der Detektoren bzw. des Spektrometers, der nicht exakt bekannten Lage des Photonenstrahls und des Gasjets und unterschiedlichen Laufzeiten innerhalb der Signalleitungen.

Bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 24,58$  eV werden Elektronen mit einer Energie von 0 eV erzeugt. Mit diesen Daten kann der Ortsnullpunkt auf dem  $He^+$ -Detektor bestimmt werden. Er liegt aufgrund der Teilchengeschwindigkeit des Gasjets ca. 18 mm oberhalb der Detektormitte bzw. der Spektrometerachse.

Die Position des Elektronendetektors relativ zur Reaktionszone kann nicht wie beim  $He^+$ -Detektor direkt ermittelt werden, da die Flugbahnen der Elektronen vom Erdmagnetfeld zu stark beeinflusst werden. Der Auftreffort  $(x_e, y_e)$  der 0 eV-Elektronen stimmt daher nicht mit der realen Position  $(x_0, y_0)$  der Reaktionszone im Raum überein. Diese Abweichung muß in Abhängigkeit vom Magnetfeld bestimmt werden, indem die Flugbahn eines 0 eV-Elektrons numerisch berechnet wird. Dafür müssen die Komponenten des Erdmagnetfeldes bekannt sein. Das ist jedoch am Anfang der Kalibrierung nicht der Fall.

Dies ist jedoch nur scheinbar ein Widerspruch. Für jeden beliebigen Wert der Magnetfeldkomponenten kann die Abweichung  $\Delta x = x_e - x_0$  und  $\Delta y = y_e - y_0$  ermittelt werden, indem die Flugbahn eines 0 eV-Elektrons numerisch berechnet wird.

In Abschnitt 5.3.4 wird beschrieben, wie die Komponenten  $B_x$  und  $B_y$  des Erdmagnetfeldes ermittelt werden. Hierbei werden viele verschiedene Werte für  $B_x$  und  $B_y$  überprüft. Die Werte werden optimiert, indem nach der besten Energieauflösung gesucht wird. Für jedes neu gewählte  $(B_x, B_y)$ -Paar müssen die Abweichung  $x_e - x_0$  und  $y_e - y_0$  zuvor numerisch berechnet werden. Die beste Energieauflösung wird mit  $B_x = 19 \mu\text{T}$  und  $B_y = -25 \mu\text{T}$  erreicht. Die magnetfeldbedingten Abweichungen  $\Delta x, \Delta y$  betrugen in diesem Fall ca.  $\Delta x = -2,1$  mm bzw.  $\Delta y = -1,5$  mm.

### 5.3.3 Zeitnullpunkt

Das elektronische Bunchmarkersignal ist zwar zu den Lichtpulsen synchronisiert. Zwischen beiden Ereignissen gibt es jedoch einen konstanten zeitlichen Versatz, der von der nicht bekannten Kabellänge zwischen Experiment und Taktgeber und anderen Faktoren bestimmt wird. Dieser Korrekturwert ist korrekt bestimmt, wenn die Impulsverteilung der 0 eV-Elektronen in Flugzeitrichtung bei  $p_z = 0$  liegt. Auch hier muß das Erdmagnetfeld berücksichtigt werden, das eine Änderung der Flugzeit um ca. 0,1 ns bewirkt.

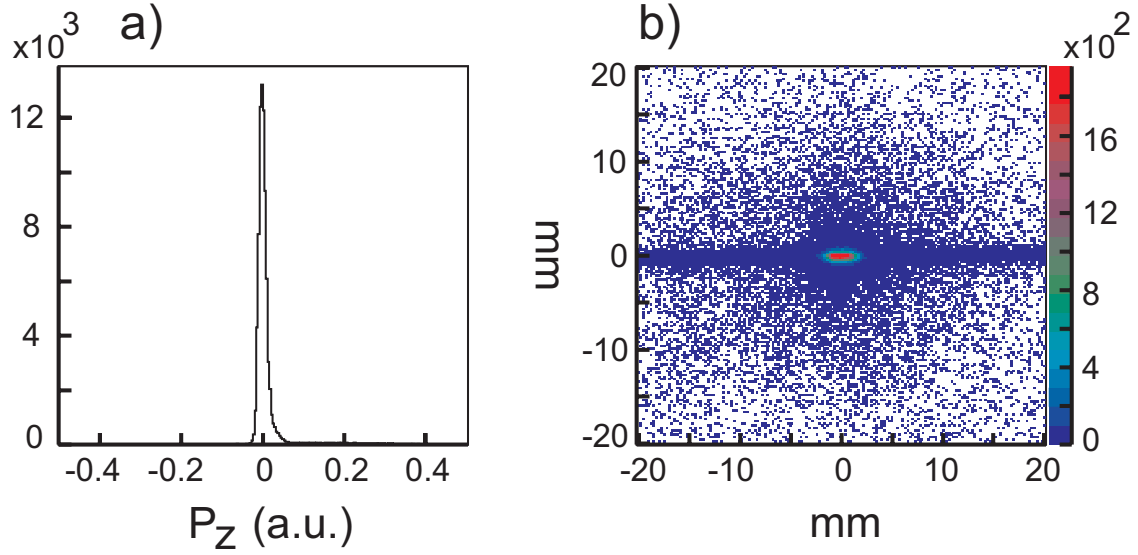


Abbildung 5.4: Kalibrierung mit 0 eV-Elektronen a) Impulsverteilung in Flugzeitrichtung. b) Ortsbild auf dem Elektronendetektor. Die horizontale Struktur im Hintergrund wird durch Reaktionen der Photonen mit dem Restgas in der Kammer erzeugt. In dem Bild ist bereits der Einfluß des Erdmagnetfeldes berücksichtigt. Anderenfalls läge die Verteilung nicht in der Mitte, sondern einige Millimeter davon entfernt.

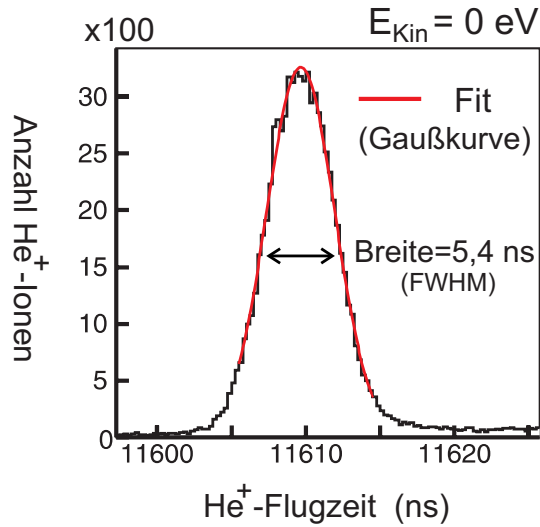


Abbildung 5.5: Die Flugzeitverteilung von  $He^+$ -Ionen mit einer kinetischen Energie von 0 eV. Die Breite wird bestimmt von der horizontalen Ausdehnung des Lichtfokus', der Zeitauflösung der Elektronik (vor allem des TDCs) und dem störenden Einfluß des Spektrometerabschlußgitters. Aus einer Breite von 5,4 ns folgt, daß die horizontale Ausdehnung des Lichtfokus' unterhalb von 0,2 mm liegt.



### 5.3.4 Das Erdmagnetfeld

Falsche Werte für die Komponenten des Erdmagnetfeldes führen in der Impulsberechnung der Elektronen zu Fehlern und verschlechtern dadurch die Energie- bzw. Winkelauflösung des Systems. Die optimalen Werte sind dann gefunden, wenn die Energieauflösung am schärfsten ist. Zu diesem Zweck wurden Daten bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 25,08$  eV aufgenommen, d.h. es wurden monoenergetische Elektronen mit einer kinetischen Energie von  $25,08$  eV -  $24,58$  eV =  $0,5$  eV erzeugt. Dieser Datensatz wurde wiederholt analysiert, wobei die Komponenten des Erdmagnetfeldes variiert wurden, um die Werte zu finden, die zu der besten Energieauflösung führen. In Bild 5.6 ist die Breite (FWHM) der gemessenen Energielinie in Abhängigkeit von den beiden Magnetfeldkomponenten  $B_x$  und  $B_y$  in Form von Graustufen dargestellt.

Die Magnetfeldkomponente  $B_z$  hat kaum<sup>4</sup> eine Auswirkung auf die Energieauflösung und bewirkt in erster Näherung lediglich eine Drehung der Impulsverteilung um die Spektrometerachse.

Für jedes Wertepaar  $(B_x, B_y)$  muß, wie in Abschnitt 5.3.2 beschrieben, der Ortsnullpunkt und Zeitnullpunkt korrigiert werden.

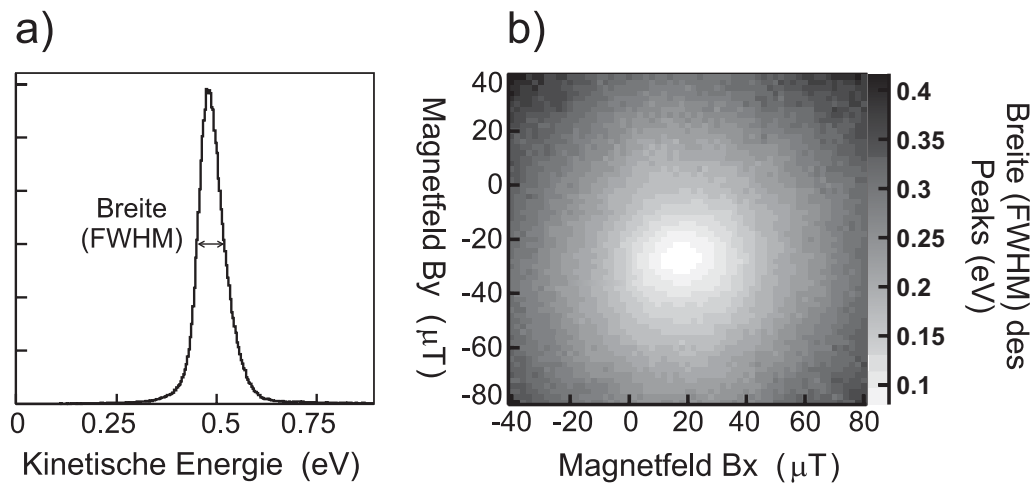


Abbildung 5.6: Extraktion der Magnetfeldkomponenten aus den Meßdaten: **a)** Energielinie bei 0,5 eV. **b)** Hier ist die Breite (FWHM) dieser Energielinie für verschiedene Werte der Magnetfeldkomponenten  $B_x$  und  $B_y$  aufgetragen. Das Minimum ist deutlich zu erkennen. Die Stärke des Erdmagnetfeldes beträgt in Deutschland ca.  $50 \mu\text{T}$  ( $100 \mu\text{T} = 1$  Gauß).

Für eine vollständige Kalibrierung der Apparatur müssen noch die genaue Stärke des elektrostatischen Feldes und die Laufzeit/Ort-Konversionsfaktoren (Seite 44) des Elektronendetektors bestimmt werden. Die Bestimmung dieser Werte kann nicht gänzlich unabhängig von den weiter oben beschriebenen Schritten erfolgen. Daher müssen die einzelnen Schritte wiederholt durchgeführt werden, bis die optimale Konfiguration gefunden ist.

<sup>4</sup>das gilt nicht mehr für starke Magnetfelder ( $B > 2$  Gauß)

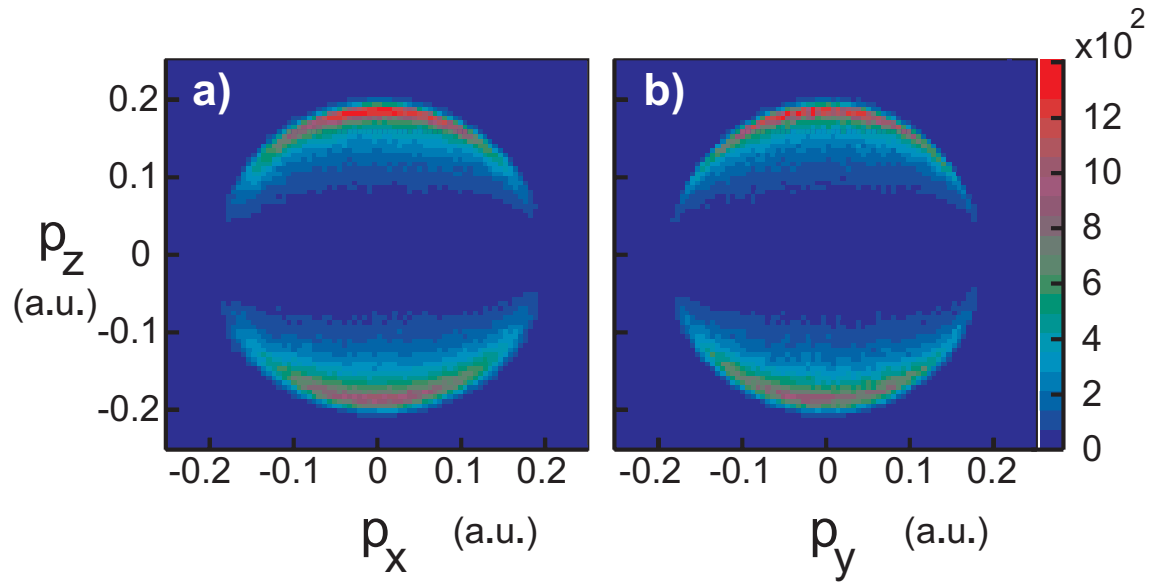


Abbildung 5.7: Kalibrierungsmessung mit 0,5 eV-Elektronen: Impulse in der x/z-Ebene und in der y/z-Ebene.

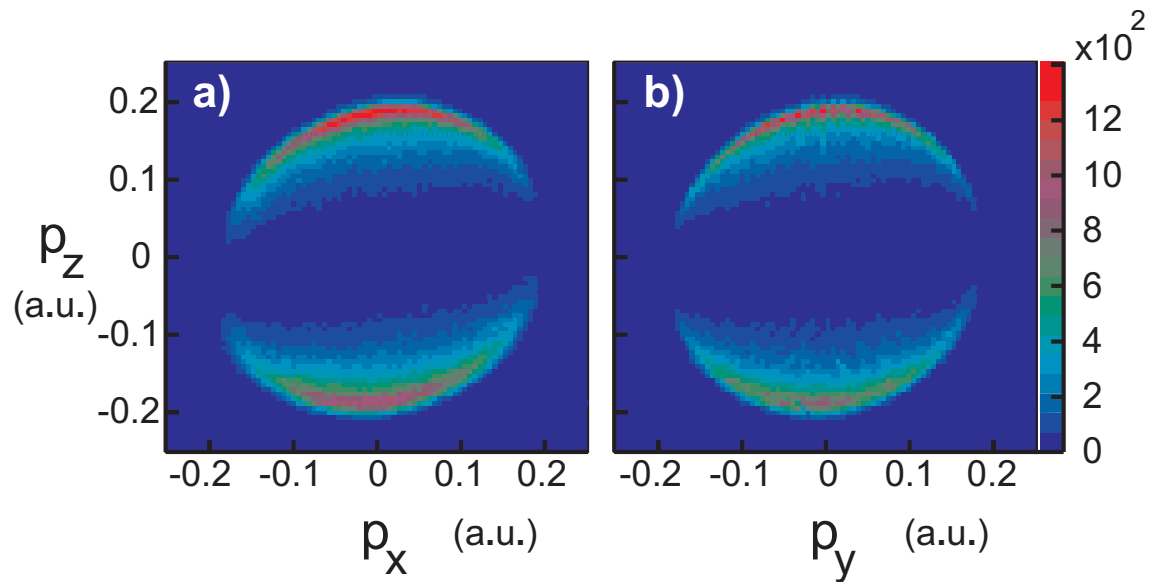


Abbildung 5.8: Die gleichen Daten wie in Bild 5.7 aber ohne Berücksichtigung des Magnetfeldes in der Impulsberechnung.

### 5.3.5 Kalibrierung der Winkelverteilung

In den Abbildungen 5.9 und 5.7 sind die Impulsverteilungen der Photoelektronen aus der Kalibrierungsmessung bei  $E_\gamma = 25,08$  eV dargestellt. Das im Grundzustand zurückbleibende  $He^+$ -Ion kann den Drehimpuls des absorbierten Photons nicht aufnehmen. Die Impulsverteilung der emittierten Elektronen muß daher die Form einer Dipolverteilung aufweisen, da das ausgehende Elektron den Drehimpuls  $\ell = 1$  des Photons davonträgt. Strenggenommen gilt dies nur für vollständig polarisiertes Licht. Der Polarisationsgrad wird im nächsten Abschnitt besprochen.

Die Dipolform wird durch die Messung gut reproduziert. Quantitativ zeigt das auch das Anfitzen des  $\beta$ -Parameters<sup>5</sup>, mit dem die Form solcher Impulsverteilungen beschrieben werden kann. Das Ergebnis des Fits beträgt  $\beta = 1,9841 \pm 0,001$ . Das liegt dicht am Idealwert<sup>6</sup>  $\beta = 2$ . Aus diesem Wert kann geschlossen werden, daß die Winkelauflösung der Apparatur ausreichend ist, um auch geringe Änderungen der Winkelverteilungen nachzuweisen. Abbildung 5.7 zeigt die gemessene Dipolverteilung im Impulsraum in der xz-Ebene bzw. yz-Ebene. Zum Vergleich sind die gleichen Daten in Abbildung 5.8 dargestellt - hier jedoch wurde das Magnetfeld in den Formeln zur Impulsberechnung nicht berücksichtigt. Die dadurch entstehenden Verzerrungseffekte sind für langsamere Elektronen ( $E_{\text{kin}} < 0,5$  eV) noch gravierender.

### 5.3.6 Der Polarisationsgrad (Stokesparameter)

Die Reinheit der Polarisation der produzierten Synchrotronstrahlung ist eine wichtige Kenngröße. Anhand der bereits weiter oben beschriebenen Kalibrierungsmessung bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 25,08$  eV kann der Polarisierungsgrad bestimmt werden, da in diesem Fall die Emissionsverteilung der Elektronen bekannt ist ( $\beta = 2$ ). Das Ergebnis des vorherigen Abschnittes, d.h. die Tatsache, daß der gemessene  $\beta$ -Parameter sehr dicht am Idealwert  $\beta = 2$  liegt, ist bereits ein Hinweis darauf, daß der Polarisationsgrad der Strahlung sehr hoch ist.

Der Grad der Polarisation wird durch den Stokesparameter  $S_1$  ausgedrückt. Er kann mit Hilfe von Gl. 2.15 (S. 21) aus der Kalibrierungsmessung ermittelt werden. Hierzu werden ausschließlich Elektronen berücksichtigt, die innerhalb der Ebene liegen, die orthogonal zum Lichtstrahl orientiert ist ( $|p_x| < 0,015$  a.u.). Für diesen Fall ( $\beta = 2$ ,  $\phi = 0$ ) vereinfacht sich Gl. 2.15 zu

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\theta} = \frac{\sigma_{\text{total}}}{4\pi} \frac{3}{2} \left( 1 + S_1(2 \cos^2 \theta - 1) \right) \frac{1}{\sin \theta} \quad (5.12)$$

Der Term  $1/\sin(\theta)$  muß aufgrund der Abhängigkeit des Raumwinkelements  $d\Omega$  von  $\theta$  hinzugefügt werden. Die Daten sind zusammen mit dem Fit in Abbildung 5.10 dargestellt. Es wurde ein Stokesparameter ermittelt von  $S_1 = 1,0 \pm 1,8 \cdot 10^{-3}$ , d.h. innerhalb der Meßgenauigkeit des Systems konnte kein Anteil von vertikal polarisierter Strahlung nachgewiesen werden.

---

<sup>5</sup>Siehe Abschnitt 2.4 auf Seite 21

<sup>6</sup>Die Form einer reinen Dipolverteilung ist in Abbildung 2.9 auf Seite 21 dargestellt.

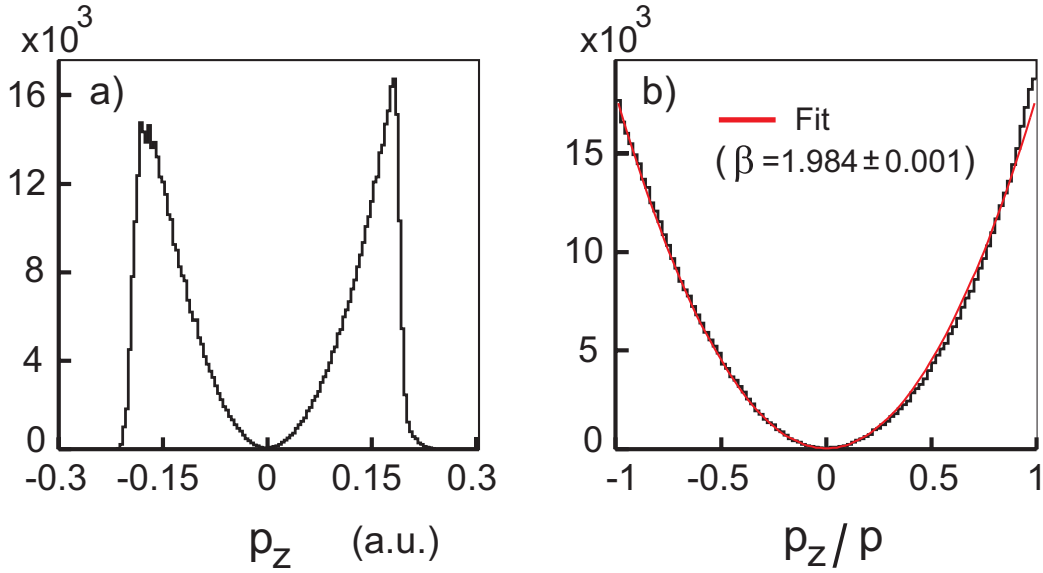


Abbildung 5.9: Ergebnisse der Kalibrierungsmessung mit 0,5 eV-Elektronen. **a)** Aufgetragen ist die z-Komponente  $p_z$  der Elektronimpulse. Die Verteilung ist nicht exakt symmetrisch, da die Meßgenauigkeit für kurze Flugzeiten geringer ist. **b)** Das Bild zeigt die z-Komponente geteilt durch den Gesamtimpuls  $p_z/p$  zusammen mit einer Fitkurve (rote Linie). Das Ergebnis des Fits ist der  $\beta$ -Parameter mit  $\beta = 1,9841 \pm 0,001$ . Dieser Wert liegt sehr dicht am Idealwert  $\beta = 2$ . Daraus kann auf eine gute Winkelauflösung und auf einen hohen Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung geschlossen werden. Letzterer wird durch den Stokesparameter ausgedrückt (Abb. 5.10).

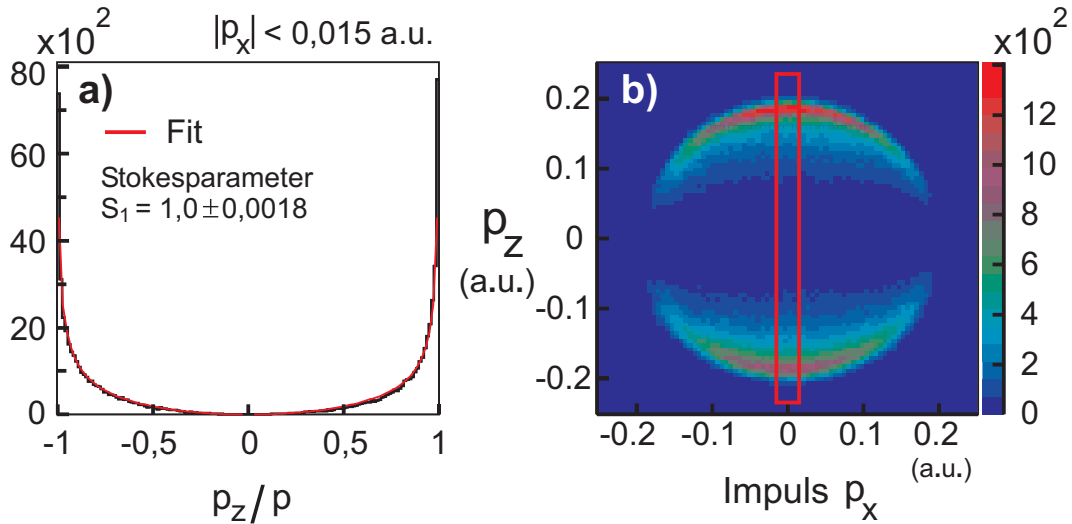


Abbildung 5.10: In Bild a sind nur diejenigen Ereignisse enthalten, die in Bild b innerhalb des eingezeichneten Rahmens liegen ( $|p_x| < 0,015$  a.u.). Aus diesen Daten kann mit Gl. 5.12 (S. 63) der Stokesparameter  $S_1$  ermittelt werden. Der Idealwert für vollständig polarisiertes Licht beträgt  $S_1 = 1$ . Innerhalb der Meßgenauigkeit der Apparatur konnte somit kein Anteil von vertikal polarisierter Strahlung festgestellt werden.

### 5.3.7 Kalibrierung der Photonenenergie bzw. der Energieauflösung

Die Energie der Photonen wird durch eine entsprechende Einstellung des Monochromators ausgewählt. Dabei gibt es eine systematische Abweichung, die je nach Meßplatz zwischen wenigen meV und einigen eV liegen kann. Diese systematische Fehlabweichung ist zudem noch abhängig von der gewählten Energie und vergrößert sich zu höheren Energien hin überproportional. Daher müssen spezielle Kalibrierungsmessungen möglichst bei unterschiedlichen Energien durchgeführt werden.

Die Einfachionisationsschwelle kann sehr leicht identifiziert werden, da sie beliebig scharf ist. Unterhalb von 24,58 eV kann keine Photoionisation von Helium erfolgen. Der Monochromator mußte auf 24,575 eV eingestellt werden, um die exakte Position dieser Schwelle zu finden. Die systematische Abweichung war demnach bei dieser Energie sehr gering.

Eine weitere Messung wurde an der  $2, 1_4$ -Resonanz bei 64,136 eV durchgeführt. Sie hat die charakteristische Form eines Fano-Profiles<sup>7</sup> [16, 17]. In Abbildung 2.3 auf Seite 9 ist sie durch einen Rahmen hervorgehoben. Die Breite dieser Resonanz  $\Gamma$  ist bekannt. Messungen [45] und Rechnungen [58, 59] haben die folgenden Werte ergeben:

$$\begin{aligned} \Gamma &= 6,0 \text{ meV}, q = -2,40, E_R = 64,1358 && [45] \text{ bzw.} \\ \Gamma &= 5,5 \text{ meV}, q = -3,32, E_R = 64,1364 && [58] \text{ und} \\ \Gamma &= 5,7 \text{ meV}, q = -2,93, E_R = 64,1370 && [59]. \end{aligned}$$

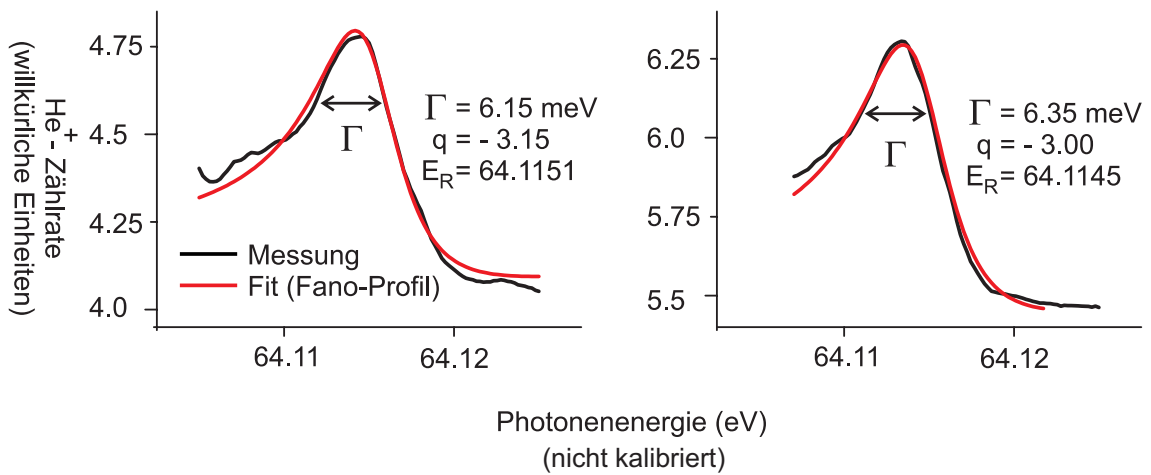


Abbildung 5.11: Zwei unabhängige Messungen der  $He^+$ -Rate bei der Resonanz  $2, 1_4$  bei 64,136 eV. Nach der alten Schreibweise ist das die  $(n = 4)$ -Resonanz der  $(2n-)$ -Serie. Sie taucht auch in den Abbildungen 2.2 b und 2.3 auf. An die Daten wurde ein Fano-Profil angefitet (Abb. 5.11). Aus dem Vergleich der ermittelten Breiten mit Literaturwerten [45, 58, 59] folgt, daß die Auflösung der Photonenenergie bei dieser Energie besser als 3,17 meV ist (d.h. ca. 3,9 meV bei einer Photonenenergie von 78,5 eV)

<sup>7</sup>siehe auch Seite 11

An die Daten wurde ein Fano-Profil angefitet. Aus dem Vergleich des kleinsten Literaturwertes mit dem Ergebnis der Fits ( $\Gamma < 6,35$  meV) folgt eine Energieauflösung von ca. 3,17 meV (FWHM) bei 64,136 eV (d.h. ca. 3,9 meV (FWHM) bei einer Photonenenergie von 78,5 eV). Höchstwahrscheinlich war die Auflösung besser. Wird mit den experimentellen Werten aus [45] gerechnet, so ergibt sich daraus eine Energieauflösung von ca. 2,9 eV (FWHM) bei 78,5 eV. Die relative Abweichung in der Position der Resonanz beträgt ca. 21 meV.

Zusätzlich zu diesen Messungen können die Schwellen der einzelnen Endzustände des zurückbleibenden  $He^+$ -Ions sehr genau ermittelt werden. Hierzu werden die Linien aus Abbildung 6.6 auf Seite 78 betrachtet (In dieser Abbildung ist die x-Achse bereits kalibriert). Die Schnittpunkte dieser Linien mit der x-Achse ergeben die jeweilige Schwelle, an der ein neuer Endzustand  $He_{(N)}^+$  bevölkert werden kann. Die Positionen dieser Schwellen können für  $He^+$  leicht ausgerechnet werden (Gl. 2.1, Seite 4). Nach dieser Methode ergab sich eine Abweichung der absoluten Photonenenergie vom am Monochromator eingestellten Nominalwert von ca. 23 meV. Die Ergebnisse der beiden voneinander unabhängigen Kalibrierungsmethoden sind demnach konsistent.

### 5.3.8 Ergebnisse der Kalibrierung

Die Skala der absoluten Photonenenergie konnte auf ca. 3 meV genau kalibriert werden.

Für die Photonenenergieauflösung kann eine obere Grenze von  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV für den Bereich  $E_\gamma < 79$  eV angegeben werden.

Innerhalb der Meßgenauigkeit konnte kein Anteil von vertikal polarisierter Strahlung nachgewiesen werden. Der Grad der Polarisation wird durch den Stokesparameter<sup>8</sup>  $S_1$  quantitativ ausgedrückt. Eine Kalibrierungsmessung ergab  $S_1 = 1,0 \pm 1,8 \cdot 10^{-3}$ .

Die Auflösung  $\Delta E_{\text{kin}}$  des Spektrometers kann direkt aus den gemessenen Daten abgelesen werden (Bspw. aus Abb. 6.1 auf Seite 72). Sie ist in Abbildung 5.12 gegen die kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  der Elektronen aufgetragen. Diese Auflösung bezieht sich lediglich auf die Messung der kinetischen Energien der Elektronen und sollte nicht mit der Photonenenergieauflösung  $\Delta E_\gamma$  verwechselt werden. Aus Abbildung 5.12 geht hervor, daß die Auflösung der kinetischen Energie  $\Delta E_{\text{kin}}$  ihrerseits von der kinetischen Energie abhängt. Der Grund dafür liegt in der konstanten Orts- und Zeitauflösung der Detektoren, die zu einer nahezu konstanten Impulsauflösung des Systems zwischen  $\Delta p_e = 15,9 \cdot 10^{-3}$  a.u. und  $\Delta p_e = 21,1 \cdot 10^{-3}$  a.u. führt.

## 5.4 Untergrundreduktion

Während des Experiments laufen innerhalb des Spektrometers eine Vielzahl von verschiedenen Prozessen ab, bei denen Elektronen und auch positive Ionen frei werden. Dazu gehören im einzelnen:

---

<sup>8</sup>siehe Abschnitt 5.3.6 auf Seite 63

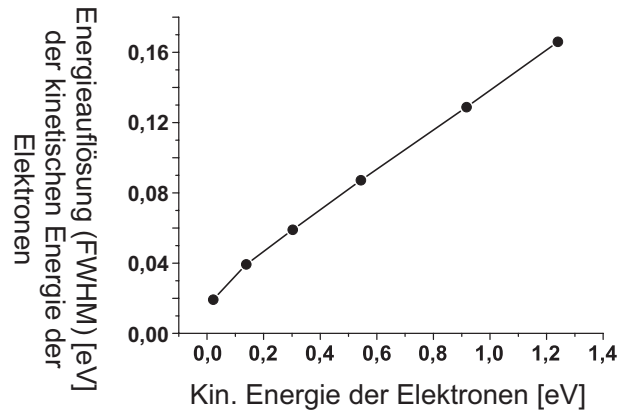
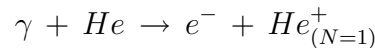


Abbildung 5.12: Die Energieauflösung  $\Delta E_{\text{kin}}$  des Spektrometers in Abhängigkeit von der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  der Elektronen. Die Größe  $\Delta E_{\text{kin}}$  sollte nicht mit der Photonenenergieauflösung  $\Delta E_{\gamma}$  verwechselt werden ( $\Delta E_{\gamma} < 3,9 \text{ meV}$ ).

1. Reaktionen zwischen Photonen und Molekülen aus dem Restgas ( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $He$  und Kohlenwasserstoffe)
2. Erzeugung von Photoelektronen an Oberflächen durch Absorption von gestreuten Photonen.
3. Herausschlagen von Elektronen aus den Oberflächen der Spektrometerkomponenten durch schnelle Elektronen, die vorwiegend durch die Reaktion



entstehen. Dieser Prozeß ist der bei weitem problematischste.

4. Ion/Elektron-Rückkopplung zwischen den Detektoren. Während des Betriebs der Detektoren werden geladene Teilchen produziert, die in ungünstigen Fällen auf dem gegenüberliegenden Detektor auftreffen können. Dieser Prozeß kann sich in Form einer Rückkopplung verstärken.

Der unter Punkt 3 beschriebene Prozeß ist verantwortlich für den größten Teil des Untergrundes. Genauer gesagt werden hierdurch  $e^-/He^+$ -Paare erzeugt, die auf den Detektoren Signale auslösen, die zeitlich so angeordnet sind, daß sie von der Koinzidenzschtaltung kaum von richtigen Ereignissen getrennt werden können. Solche Ereignisse können jedoch später vom Analyseprogramm sehr effektiv aussortiert werden.

#### 5.4.1 Erster Schritt: Grobe Selektion während der Aufnahme

Die Menge dieser unerwünschten Reaktionen übersteigt die Anzahl der eigentlich zu beobachtenden Reaktionen  $\gamma + He \rightarrow e^- + He_{(N>3)}^+$  um ein Vielfaches: Während des Betriebs wurden beispielsweise auf dem Elektronen-Detektor im Mittel ca. 50000 und

auf dem  $He^+$ -Detektor ca. 16000 Teilchen pro Sekunde nachgewiesen, wohingegen die tatsächliche Rate an interessanten Reaktionen nur einige hundert betrug. Um nicht all diese Ereignisse aufzunehmen, müssen schon während des Betriebs die Ereignisse gefiltert werden, so daß nur eine engere Auswahl aufgezeichnet wird. Diese Aufgabe erfüllt eine schnelle Koinzidenzschaltung (siehe Abschnitt 4.8 auf Seite 48). Sie überprüft jedes Zeitsignal vom Elektronendetektor daraufhin, ob es innerhalb eines gewissen Zeitfensters hinter dem vorangegangenen Lichtpuls liegt und ob innerhalb eines weiteren Zeitfensters ein Ion auf dem  $He^+$ -Detektor nachgewiesen wurde. Das Ergebnis dieser Entscheidung liegt somit erst im nachhinein vor. Der Time-to-Digital-Konverter, der die Laufzeitinformation der Signale in digitale Werte umwandelt, muß daher alle einkommenden Signale zunächst zwischenspeichern und auf die Entscheidung der Koinzidenzschaltung warten, die ihn anweist, seine Daten an den Computer zu übermitteln oder sie zu verwerfen. Die Schaltung reduziert den Datenstrom auf ca. 6000 Ereignisse pro Sekunde. Ein Großteil dieser Daten beinhaltet noch solche Ereignisse bei denen ein schnelles Elektron ein Sekundärelektron aus der Oberfläche des Spektrometers herausgeschlagen hat, das dann durch das Spektrometerfeld auf den Detektor geleitet wurde. Im nächsten Schritt werden auch solche Ereignisse herausgefiltert.

### 5.4.2 Zweiter Schritt: Genaue Selektion während der Datenauswertung

Im Grunde genommen genügt eine einzige Bedingung, um die störenden Untergrundreaktionen von den interessanten Ereignissen zu trennen: Zwischen dem Elektron und dem  $He^+$ -Ion muß Impulserhaltung erfüllt sein. Der Impulsübertrag des Photons ist sehr gering und muß daher in der Impulsbilanz nicht berücksichtigt werden<sup>9</sup>. Ist die Impulserhaltung  $\vec{P}_{e^-} = \vec{P}_{He^+}$  nicht erfüllt, so stammen die beiden Teilchen nicht aus ein und derselben Reaktion, und die aufgenommenen Daten werden verworfen.

Die Impulserhaltung kann nur innerhalb der Meßgenauigkeit des Systems überprüft werden. Da die Ortsauflösung auf dem  $He^+$ -Detektor sehr stark durch das davorliegende Spektrometerabschlußgitter verschlechtert wird, ist die Impulsberechnung des  $He^+$ -Ions in diesen Raumrichtungen nicht sinnvoll. Es genügt jedoch, nur die Impulserhaltung in Flugzeitrichtung (d.h. entlang der z-Achse) zu überprüfen und zusätzlich nur solche Ereignisse zuzulassen, bei denen das  $He^+$ -Ion auf dem  $He^+$ -Detektor innerhalb eines inneren Bereiches mit geringer Auslenkung liegt (Abb. 5.14).

Abbildung 5.13 a zeigt die Summe der Impulse der beiden Teilchen in z-Richtung. Dargestellt sind Daten aus zwei Kalibrierungsmessungen mit 0 eV- und 0,5 eV-Elektronen. Diese Daten sind von vornherein frei von Untergrund, da es keine schnellen Elektronen gibt, die Sekundärelektronen erzeugen könnten. Die Werte liegen nicht exakt bei Null, sondern sind aufgrund der Meßgenauigkeit des Systems etwas verteilt. In Abbildung

---

<sup>9</sup>Der Impuls des Photons  $p_\gamma = 0,021$  a.u. geht im Verhältnis  $m_{He}/m_e$  auf das  $He^+$ -Ion über [70]. Das führt zu einem örtlichen Versatz in Richtung des Lichtstrahls von  $\Delta x \approx 6 \mu m$  für das  $He^+$ -Ion bzw.  $\Delta x \approx 0,25 \mu m$  für das Elektron. Diese Werte liegen weit unterhalb der Ortsauflösung der Detektoren ( $\Delta R \approx 0,4$  mm). Der Einfluß des Photonenimpulses ist daher vernachlässigbar.



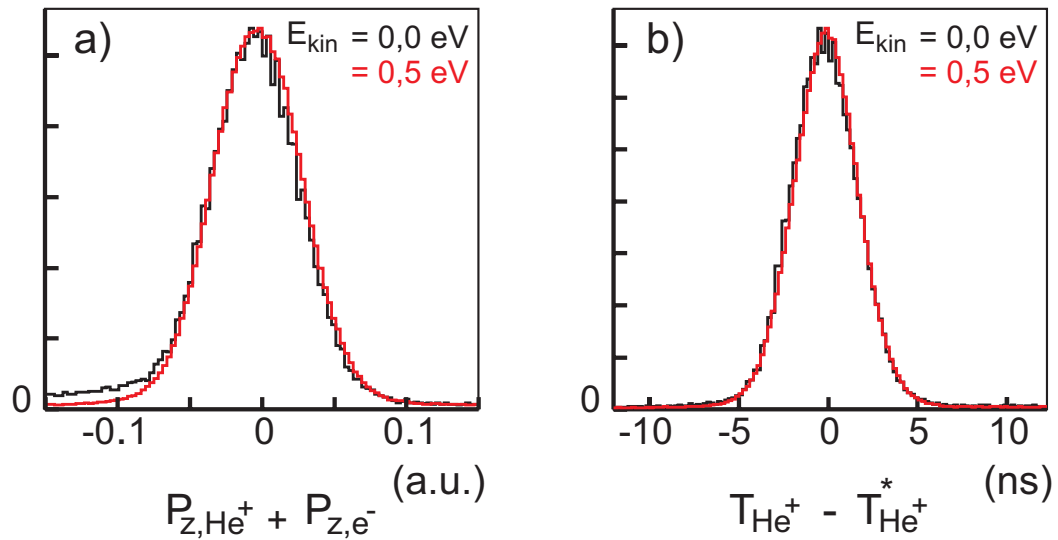


Abbildung 5.13: **a)** Die Summe der z-Komponenten des Elektronimpulses und des Impulses des  $He^+$ -Ions **b)** Differenz zwischen gemessener  $He^+$ -Flugzeit  $T_{He^+}$  und berechneter Flugzeit  $T_{He^+}^*$ , die aus dem z-Impuls des Elektrons berechnet wurde. (schwarze Linie: Kalibrierungsmessung mit 0 eV-Elektronen, rote Linie: Kalibrierungsmessung mit 0,5 eV-Elektronen)

5.13 b ist die Impulserhaltung auf eine andere Art dargestellt: Anhand des gemessenen Impulses des Elektrons wird die Flugzeit des  $He^+$ -Ions errechnet und mit der tatsächlich gemessenen verglichen. In den Bildern sind jeweils die Daten aus zwei Kalibrierungsmessungen mit einer Elektronenenergie von 0 eV und 0,5 eV wiedergegeben. Die Spektren sind weitgehend identisch. Die Genauigkeit, mit der die Impulserhaltung überprüft werden kann, ist demnach kaum von der Energie der Teilchen abhängig. Das ist eine gute Voraussetzung für das Herausfiltern des Untergrundes.

Die wichtigste Filterbedingung besteht darin, daß alle Ereignisse verworfen werden, die in Bild 5.13 b außerhalb von  $\pm 7$  Nanosekunden liegen. Dieser erste Schritt - die Überprüfung der Impulserhaltung in z-Richtung - reduziert den Untergrund erheblich. In Abbildung 5.14 ist ein Spektrum der kinetischen Energie der Elektronen bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 78,262$  eV mit verschiedenen Filterbedingungen dargestellt. In Bild 5.14 b sind alle Ereignisse ohne jegliche Selektion enthalten. Die schwarze Kurve in Bild a ist aus dem gleichen Datensatz erzeugt, allerdings unter Bedingung auf Impulserhaltung in z-Richtung. Wird zusätzlich eine Bedingung auf den Auftreffort des  $He^+$ -Ions angewendet, so erhält man die rote Kurve, die weitestgehend untergrundfrei ist.

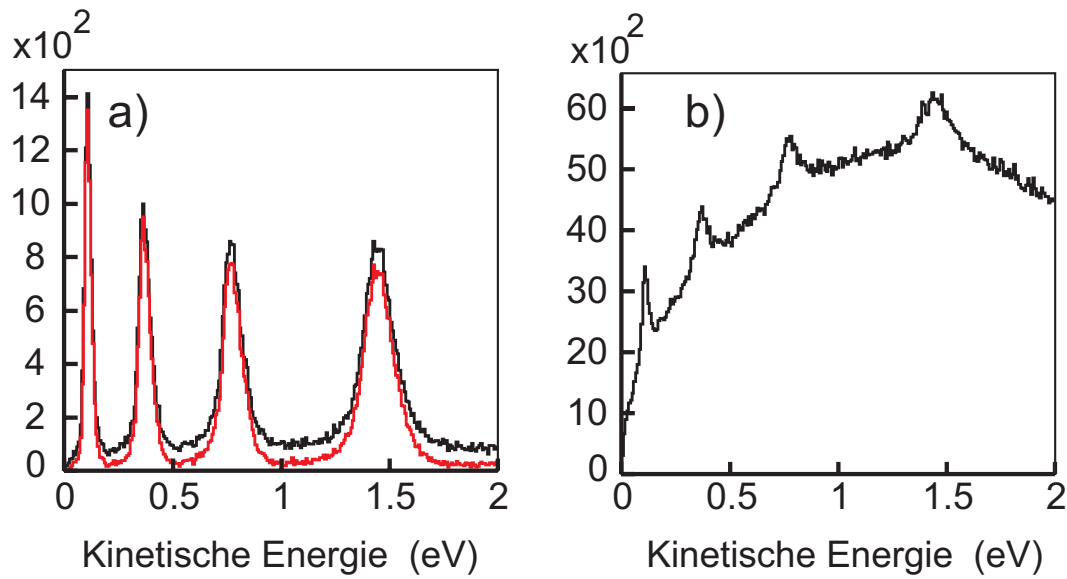


Abbildung 5.14: Spektrum der kinetischen Energien der Elektronen bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 78,262$  eV. **a)** Rote Linie: Spektrum mit Filterbedingung auf Impulserhaltung in z-Richtung und Bedingung auf den Auftreffer des  $He^+$ -Ions. Schwarze Linie: Bedingung nur auf Impulserhaltung in z-Richtung. **b)** Zum Vergleich der gleiche Datensatz ohne jegliche Filterbedingung.

# Kapitel 6

## Durchführung der Messung

Die Energie der Photonen wurde von 78,17 eV aus in Schritten von jeweils 3 meV bis 78,9 eV erhöht - d.h. von der Schwelle für  $He_{N=8}^+$  aus bis dicht unterhalb der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV. Bei jedem Schritt wurden zwischen 35 Minuten und 90 Minuten lang Daten aufgenommen. Je nach Strahlintensität des Synchrotrons war eine kürzere oder eine längere Meßdauer notwendig, um bei jeder neu eingestellten Photonenenergie die gleiche Menge Daten aufzunehmen.

In der Region zwischen 78,5 eV und 78,815 eV wurde eine Meßdauer von nur ca. 9 Minuten pro Schritt gewählt, d.h. es wurde sehr viel weniger Statistik aufgenommen. Da die Strahlzeit nur aus ca. 8 Meßtagen bestand, war dieser Schritt nötig, um einen möglichst großen Bereich der Photonenenergie abzudecken. In dieser Region sind die Ergebnisse der Messung von geringerer Qualität, weil die statistischen Fehler größer ausfallen. Dies fällt bei den Winkelverteilungen stärker ins Gewicht als bei den partiellen Wirkungsquerschnitten.

Oberhalb von 78,815 eV wurde wieder eine lange Meßdauer pro eingestellter Photonenenergie gewählt, um genügend Statistik aufzunehmen, damit auch für hohe Endzustände die jeweiligen Winkelverteilungen ermittelt werden konnten.

Für die letzten beiden Abschnitte, d.h. ab einer Photonenenergie von  $E_\gamma=78,5$  eV wurde ein schwächeres Spektrometerfeld gewählt, um eine bessere Auflösung für niederenergetische Elektronen zu erreichen.

Die genauen Angaben bezüglich dieser drei Abschnitte sind in Tabelle D auf Seite 118 aufgeführt.

### 6.1 Aufbereitung der Daten

Da der Bereich zwischen 78,17 eV und 78,9 eV in Schritten von 3 meV abgedeckt wurde, besteht der gesamte Datensatz aus ca. 280 Einzelmessungen, die in der späteren Auswertung zu einer Gesamtheit zusammengesetzt wurden. Diese Aufgabe übernimmt

das zu diesem Zweck geschriebene Auswertungsprogramm, das die im folgenden beschriebenen Schritte durchführt.

Für jeden einzelnen Schritt in der Photonenenergie wird zunächst ein Spektrum der kinetischen Energien der Elektronen bzw. ihrer Impulse erzeugt (Bild 6.1 a und b). Jeder dieser Peaks kann aufgrund der Energieerhaltung einem Reaktionskanal  $\gamma + He \rightarrow He_{(N)}^+ + e^-$  zugeordnet werden. Zu diesem Zweck wird im nächsten Schritt an jeden Peak eine Gaußkurve angefitet, um die exakten Positionen der Peaks zu bestimmen.

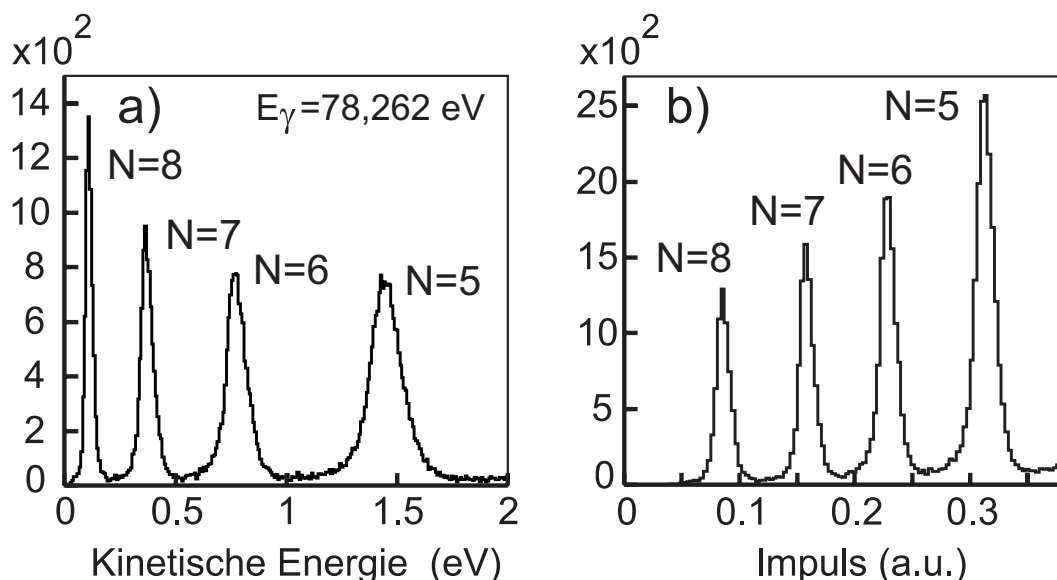


Abbildung 6.1: a) Spektrum der kinetischen Energien der Elektronen bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma = 78,262 \text{ eV}$ . Aufgrund der Energiebilanz kann den einzelnen Peaks jeweils ein Endzustand (Hauptquantenzahl  $N$ ) des  $He^+$ -Ions zugeordnet werden. b) Hier sind die gleichen Daten dargestellt wie in Bild a - nur sind diesmal die Impulse und nicht die Energien aufgetragen.

Es ist wichtig, daß dieser Schritt im Impulsbild durchgeführt wird, da nur hier alle Peaks symmetrisch und gleich breit sind.

Die Grenzen zwischen den Peaks werden nun mit Hilfe der Peakpositionen ermittelt. Dabei wird immer der Mittelwert zweier Positionen als Grenze angesehen. Nun wird der Datensatz ein zweites Mal eingelesen. Bei diesem zweiten Durchgang werden Ereignisse auf einer Seite solch einer Grenze jeweils dem nächstgelegenen Peak zugeordnet. Für jeden Peak werden nun die Anzahl der Ereignisse gezählt, aus denen er besteht, d.h. sein Integral wird ermittelt. Aus diesem Wert wird im Verlauf der Auswertung der partielle Wirkungsquerschnitt des dazugehörigen Ausgangskanals berechnet werden (Abb. 7.1).

## Normierung der Einzelspektren

Bevor die Einzelspektren zu einem großen zweidimensionalen Histogramm (Abb. 6.6) kombiniert werden können, müssen sie normiert werden. Der Grund hierfür ist mit der Funktionsweise des Synchrotrons verbunden. Der am Undulator erzeugte Photonenfluß ist zeitlich nicht konstant. Über einige Stunden hinweg nimmt die Lichtintensität ab, weil die Anzahl der im Ring eingeschlossenen Elektronen absinkt. Grund dafür sind Stöße der umlaufenden Elektronen mit dem Restgas im Ring und auch interne Stöße innerhalb der Elektronpakete. Nach ca. 8 Stunden müssen deshalb neue Elektronenpakete in den Ring injiziert werden.

Genaugenommen müßten daher die Meßdaten in den Einzelspektren auf eine konstante Anzahl von Photonen normiert werden, um sie miteinander vergleichen zu können. Die Photonenrate kann indirekt gemessen werden, indem am letzten Fokussierungsspiegel der Photoelektronenstrom gemessen wird. Dieser Strom entsteht beim Herausschlagen von Elektronen aus dem Spiegelmateriale durch einen Teil der Synchrotronstrahlung. Er ist proportional zur Flußrate der Photonen. Zum Zweck der späteren Normierung der Daten wurde der Spiegelstrom synchron zu den Detektordaten aufgezeichnet.

Prinzipiell können mit dieser Information die Daten normiert werden. Voraussetzung dafür ist, daß die Dichte im Gasstrahl und vor allen Dingen seine Lage relativ zum Photonenstrahl über den gesamten Zeitraum der Messung absolut konstant waren. Diese Bedingungen waren höchstwahrscheinlich erfüllt. Eine sichere Überprüfung ist jedoch nicht möglich. Des weiteren zeigte sich, daß die Messung des Spiegelstroms unregelmäßig auftretenden Störungen unterlag, deren Ursache nicht identifiziert werden konnte.

Aufgrund dieser Unsicherheiten wurde auf eine simple und weniger störanfällige Methode der Normierung zurückgegriffen.

Es wurde nicht direkt nach der Rate der Photonen normiert, sondern nach der Gesamtsumme der nachgewiesenen  $He^+$ -Ionen. Dieses Vorgehen beruht darauf, daß die Summe aller nachgewiesener  $He^+$ -Ionen proportional zur Photonenrate ist und sich der Proportionalitätsfaktor innerhalb des betrachteten Energiebereichs nicht signifikant ändert. An der Gesamtproduktion von  $He^+$ -Ionen haben die Endzustände  $He^+_{(N=1,2,3)}$  mit über 99% den größten Anteil [64]. Innerhalb der hier betrachteten Energieregion, d.h. zwischen 78 eV und der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV, kann das Verhältnis zwischen Gesamtrate der  $He^+$ -Ionen und der Photonenrate als nahezu konstant angesehen werden (siehe Abb. 6.2).

Die Einzelspektren wurden somit normiert, indem ihr Inhalt durch die Anzahl der in der gleichen Zeit nachgewiesenen  $He^+$ -Ionen geteilt wurde, d.h. es wurde die Größe  $\sigma_N/\sigma_{1,2,3\dots}$  berechnet. Solch ein Quotient von zwei partiellen Wirkungsquerschnitten wird allgemein „Branching Ratio“ genannt. Die Bezeichnungen „Branching Ratio“ und partieller Wirkungsquerschnitt können in den folgenden Abschnitten gleichbedeutend behandelt werden, da die Summe der partiellen Wirkungsquerschnitte im hier betrachteten Energiebereich nahezu konstant ist (Abb. 6.2).



## Winkelverteilungen

Für jedes Ereignis wird die Größe  $p_z/p$ , d.h. der Quotient zwischen der z-Komponente des Elektronimpulses und dem Gesamtimpuls des Elektrons, berechnet und anhand der kinetischen Energie dem entsprechenden Reaktionskanal  $N$  zugeordnet. In diesen Spektren ist dann für jeden einzelnen Reaktionskanal die Information über die Form der Winkelverteilung der Elektronen enthalten. Die Form der Winkelverteilungen kann über den  $\beta$ -Parameter quantitativ ausgedrückt werden. Er wurde in Abschnitt 2.4 (Seite 21) eingeführt. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung 6.3 das Histogramm von  $p_z/p$  bei einer willkürlich ausgewählten Photonenenergie dargestellt. Zusätzlich ist die Fitfunktion (Gl. 2.16 von Seite 21) eingezeichnet, mit deren Hilfe der  $\beta$ -Parameter ermittelt wird. Aus jedem dieser Einzelspektren wird der  $\beta$ -Parameter extrahiert, der dann in einer geschlossenen Kurve gegen die Photonenenergie aufgetragen wird. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.10 und 7.11 (Seite 90 und 91) dargestellt. Die Einzelspektren müssen zuvor nicht normiert werden, wie es bei den partiellen Wirkungsquerschnitten der Fall ist, da der  $\beta$ -Parameter nur die Form des Histogramms widerspiegelt, nicht aber die Anzahl der Einträge. Die Anzahl der Einträge beeinflusst lediglich die Größe des statistischen Fehlers. Die Winkelverteilungen werden im Ergebnisteil auf Seite 89 diskutiert.

## 6.2 Fehlerdiskussion

### Statistische Fehler

Zum Anfang der Diskussion stellt sich die Frage nach der Qualität der Daten - d.h. welcher Teil der Strukturen in Abb. 7.2 als echt angesehen werden kann und welche Strukturen eventuell nur statistische Schwankungen darstellen. Am Anfang jeder Kurve sind die statistischen Fehlerbalken eingezeichnet, die sich allein aus der Anzahl der Ereignisse, aus denen die Peaks bestehen, ergeben. Der statistische Fehler ist demnach sehr klein. Er beträgt für den Zustand  $N=6$  im Mittel ca.  $\pm 0,8\%$  bzw. ca.  $\pm 2,0\%$  für  $N=8$ .

Es gibt weitere mögliche Fehlereinflüsse. Unter den Peaks liegt ein geringer Untergrund. Dieser Untergrund wird anteilig zu den Integralen der einzelnen Peaks hinzugezählt. Es kann jedoch angenommen werden, daß sich die Höhe und Form des Untergrundes von Messung zu Messung nicht signifikant ändert. Nur solche kurzfristigen Änderungen des Untergrundes könnten die Strukturen, die sich in Abbildung 7.2 zeigen, verfälschen<sup>1</sup>. Der mögliche Einfluß des Untergrundes wurde überprüft, indem an einigen

---

<sup>1</sup>Nur das Restvakuum in der Kammer und die Position des Photonenstrahls relativ zum Gasjet können sich auf den Untergrund auswirken, weil sich dadurch das Verhältnis zwischen den Reaktionsraten innerhalb und außerhalb des Gasjets ändern kann. Der Druck innerhalb der Versuchskammer blieb während der Messung jedoch konstant. Die von den Konstrukteuren des Strahlrohrs angegebenen möglichen Positionsänderungen des Photonenstrahls sind so gering, daß sie gegenüber der Breite des Gasjets vernachlässigt werden können - sie können daher keine Änderungen des Reaktionsratenverhältnisses verursachen.

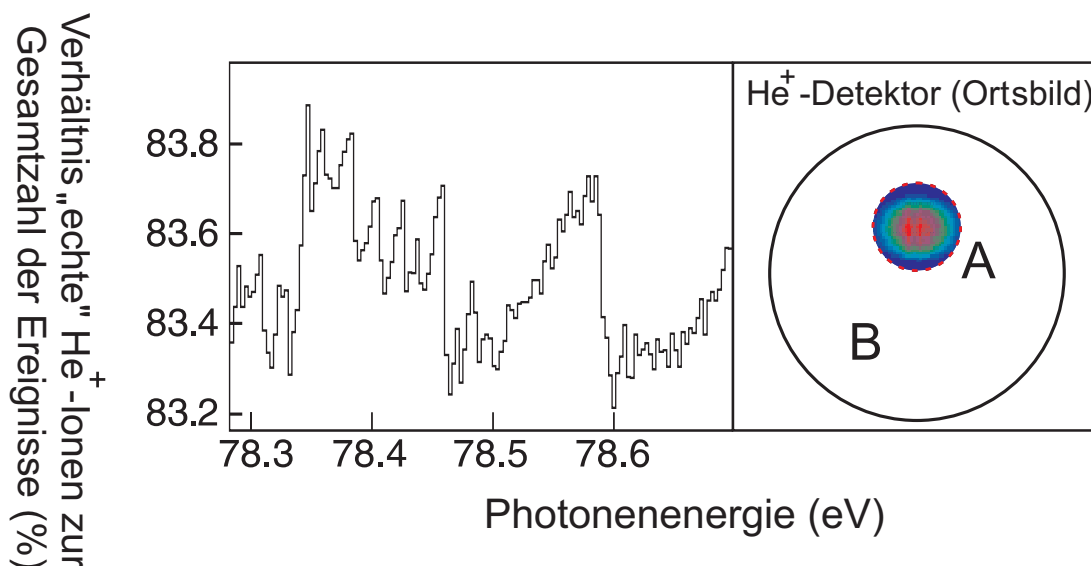


Abbildung 6.4: Das Verhältnis zwischen der Anzahl der  $He^+$ -Ionen, die aus der Kreuzungszone zwischen Gasjet und Lichtstrahl stammen (Region A) und der Gesamtanzahl aller Ionen, die auf der gesamten Fläche (A+B) aufgenommen wurden. Die relativ geringe Schwankungsbreite dieser Kurve zeigt, daß der Untergrund bei der Betrachtung der statistischen Fehler vernachlässigt werden kann.

Einzelspektren ein kombinierter Gaußfit durchgeführt wurde, wobei als zusätzlicher Freiheitsgrad ein Untergrund in der Form eines Polynoms zweiter Ordnung erlaubt war. Durch diesen Fit konnte der Untergrundanteil isoliert werden. Zwischen verschiedenen Einzelspektren zeigte sich dabei keine signifikante Änderung des Untergrundes.

Ein weiteres Diagnosemittel ist das Verhältnis zwischen der Anzahl der  $He^+$ -Ionen, die innerhalb der Kreuzungszone von Gasjet und Photonenstrahl gebildet werden und der Anzahl der Ionen, die auf der gesamten Fläche des Detektors nachgewiesen werden. Dieses Verhältnis blieb während der gesamten Messung nahezu konstant (siehe Abb. 6.4).

Anhand dieser Überlegungen kann abgeschätzt werden, daß die wahren Meßfehler höchstwahrscheinlich nicht größer sind als das zwei- bis dreifache der eingezeichneten statistischen Fehlerbalken.

### Systematische Fehler

Das Spektrometer weist für niederenergetische ( $E_{\text{kin}} < 1,35 \text{ eV}$ ) Elektronen eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  auf. Höherenergetische Elektronen können dagegen je nach Emissionsrichtung mit den Kupferplatten des Spektrometers kollidieren, d.h. es wird in diesen Fällen keine vollständige Raumwinkelakzeptanz erreicht (Abb. 6.5).

Von diesem Effekt sind diejenigen Elektronen betroffen, die während der Reaktionen



mit den Endzuständen  $He_{(N=4,5)}^+$  emittiert werden. Dadurch werden die Zählraten in diesen Reaktionskanälen vermindert.

An dieser Stelle mußte ein Kompromiß eingegangen werden. Die Untersuchung der höheren Endzustände mit einer möglichst hohen Genauigkeit erfordert ein schwaches Feld. Um auch hohe Endzustände ( $N \geq 11$ ) voneinander trennen zu können, wurde das Feld daher bei einer Photonenenergie von 78,5 eV nochmals leicht abgesenkt (von 1,94 V/cm auf 1,62 V/cm). Aus diesem Grund ist an der entsprechenden Stelle in Abbildung 7.2 (Kasten c) in den partiellen Wirkungsquerschnitten für  $N=4$  und  $N=5$  eine Stufe zu sehen.

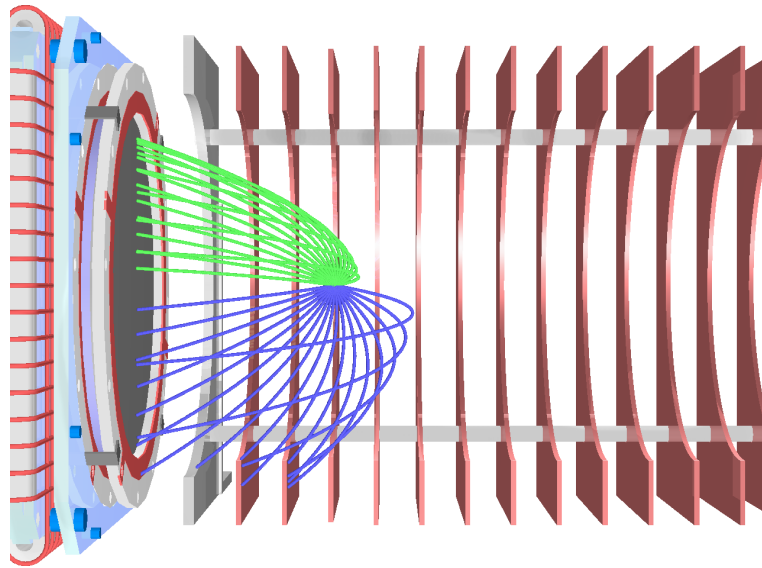


Abbildung 6.5: Ab einer gewissen kinetischen Energie (ab  $E_{\text{kin}} = 1,35$  eV) erreichen nicht mehr alle Elektronen den Elektronendetektor, weil sie mit den Kupferplatten des Spektrometers kollidieren (untere Flugbahnen). Das ist der Fall bei den Endzuständen  $N \leq 5$ . Bei  $N > 5$  werden alle Elektronen vom elektrostatischen Feld umgelenkt (obere Flugbahnen).

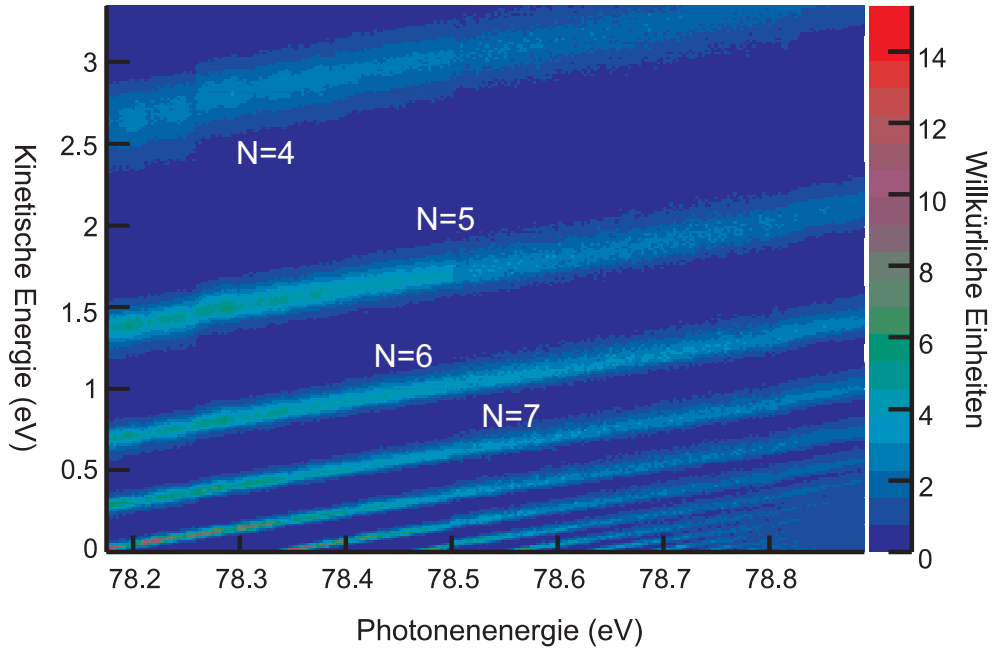


Abbildung 6.6: Die einzelnen Energiespektren werden, nachdem sie normiert wurden, zu dieser zweidimensionalen Darstellung zusammengefügt. Die Linien sind den einzelnen Endzuständen  $N$  des  $He^+$ -Ions zugeordnet. Die Änderungen der partiellen Wirkungsquerschnitte werden bereits in dieser Darstellung in Form von Intensitätsschwankungen sichtbar. Die Intensitäten, d.h. die partiellen Wirkungsquerschnitte, sind in Abbildung 7.1 aufgetragen.

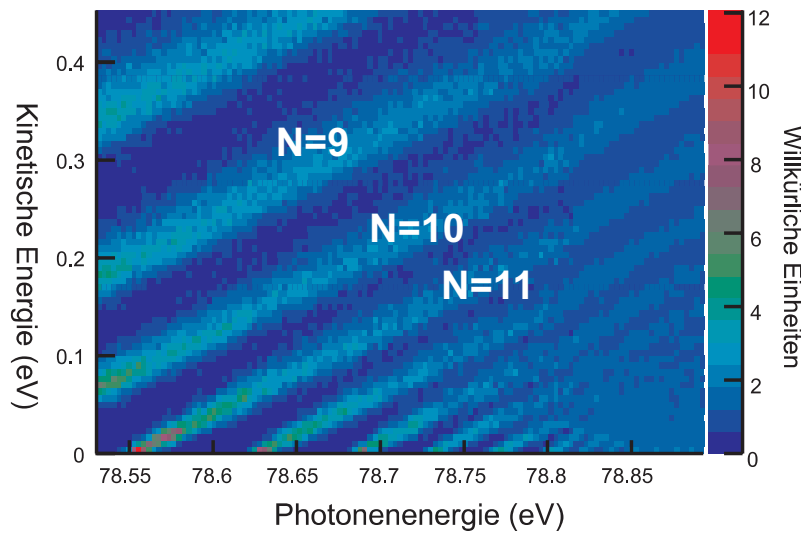


Abbildung 6.7: Eine Vergrößerung von Abb. 6.6. Die verschiedenen Endzustände können bis etwa  $N = 15$  gut getrennt werden.

# Kapitel 7

## Die Ergebnisse der Messung

### 7.1 Partielle Wirkungsquerschnitte

Die einzelnen Energiespektren können, nachdem sie normiert wurden, zu einem zweidimensionalen Bild zusammengesetzt werden (Abb. 6.6). Die Peaks der Einzelspektren bilden die Linien, die in dieser zweidimensionalen Darstellung zu sehen sind.

Mit ansteigender Photonenenergie wird in den einzelnen Reaktionskanälen mehr Überschußenergie frei, was zu einem Ansteigen der Linien führt. Überschreitet die Photonenenergie einen entsprechenden Schwellenwert, dann können neue Endzustände  $He_{(N)}^+$  populiert werden. Das zeigt sich durch das Auftauchen von neuen Linien aus der Abszisse von Abbildung 6.6.

Abbildung 7.1 zeigt die Intensitäten der einzelnen Linien, d.h. die Integrale der Peaks in den entsprechenden Einzelspektren.

Die partiellen Wirkungsquerschnitte zeigen Strukturen, die in fast allen Kurven gemeinsam auftauchen (siehe Kästen a und b in Abb. 7.2). Sehr wichtig ist dabei die Tatsache, daß diese Strukturen nicht exakt an der gleichen Photonenenergie erscheinen, was beispielsweise durch eine fehlerhafte Normierung verursacht werden könnte, sondern daß sie leicht versetzt zueinander auftreten. Diese Tendenz setzt sich über alle Kurven hinweg fort: Eine Struktur in Kurve  $N$  tritt auch in Kurve  $N - 1$  auf. Sie ist hier nur um einige meV zu höheren Photonenenergien verschoben. Aufgrund der Tatsache, daß sich die Kurven aus einer Vielzahl einzelner, voneinander unabhängiger Messungen zusammensetzten, folgt daraus der Schluß, daß diese Strukturen real sind. Dies wird zudem dadurch unterstützt, daß diese Tendenz auch in den Ergebnissen von theoretischen Rechnungen [64] sichtbar ist. Ein Vergleich der Daten mit theoretischen Vorhersagen folgt im Anschluß an dieses Teilkapitel.

Oberhalb von 78,45 eV zeigen die partiellen Wirkungsquerschnitte keine größeren Strukturen, die mit der gewählten Photonenenergieauflösung von ca. 3,5 meV aufgelöst werden können. Eine Ausnahme ist in Kasten e von Abbildung 7.2 zu sehen.

Auch wenn die Photonenenergieauflösung hier nicht ausreicht, um feinere Strukturen aufzulösen, so beinhalten die Daten dennoch die Information über die durchschnittlichen Wirkungsquerschnitte. Diese Information hilft bei der Planung von zukünftigen Experimenten, da nun sehr genau abgeschätzt werden kann, welche Energieauflösung, Schrittweite und Meßdauer nötig ist.

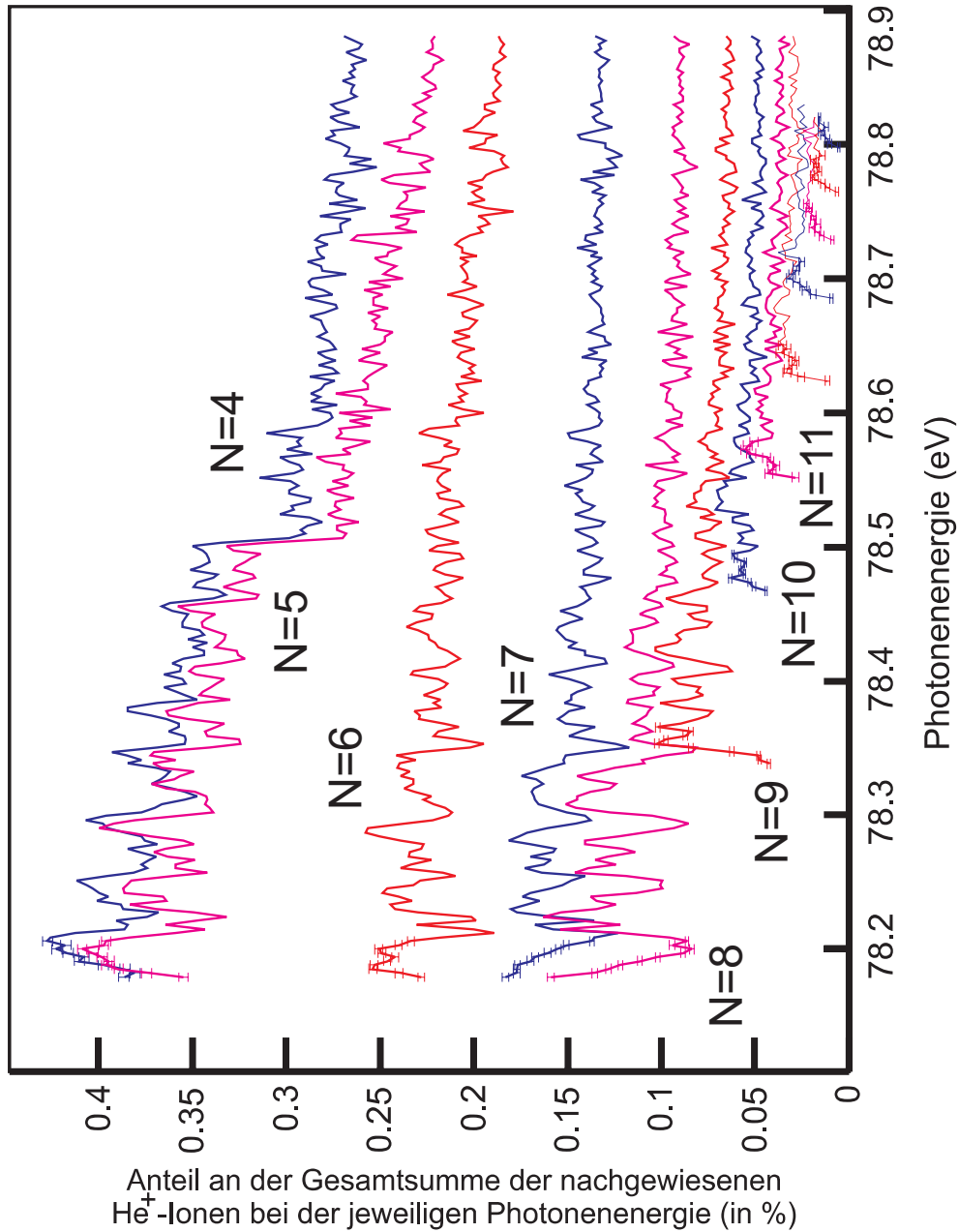


Abbildung 7.1: Die partiellen Wirkungsquerschnitte der Reaktionen  $\gamma + He \rightarrow e^- + He_{(N)}^+$ . Am Anfang jeder Kurve sind die Fehlerbalken eingezeichnet, die sich rein aus der Statistik der Daten ergeben. Die Werte für  $N=4$  und  $N=5$  sind im Vergleich zu den anderen Kurven zu niedrig, da in diesen Fällen einige der Elektronen aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit nicht mehr vom Spektrometer erfasst werden konnten. Dieser Effekt nimmt mit steigender Photonenenergie zu. Dadurch wird die abfallende Tendenz von  $N=4$  und  $N=5$  verursacht (siehe Abschnitt 6.2 auf Seite 76). Die Stufen in den Kurven für  $N=4$  bzw.  $N=5$  haben eine ähnliche technische Ursache: Das Spektrometerfeld wurde an dieser Stelle abgesenkt, um eine höhere Auflösung zu erreichen, um auch noch Zustände oberhalb von  $N=12$  trennen zu können. Das hatte zur Folge, daß ein größerer Anteil der Elektronen aus  $N=4$  bzw.  $N=5$  nicht mehr auf den Elektronendetektor geleitet wurde (siehe hierzu auch Abb. 6.5, Seite 77).

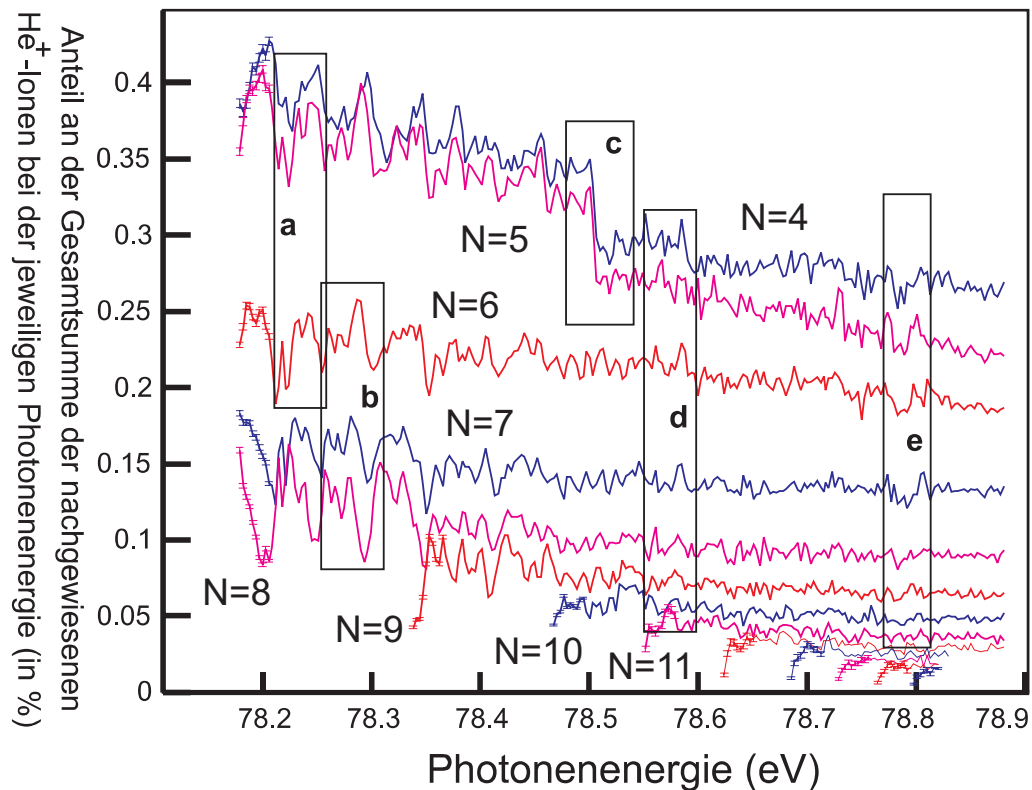


Abbildung 7.2: Einige Regionen sind für die Diskussion im Haupttext eingerahmt. Auf Seite 80 ist das Bild größer dargestellt.

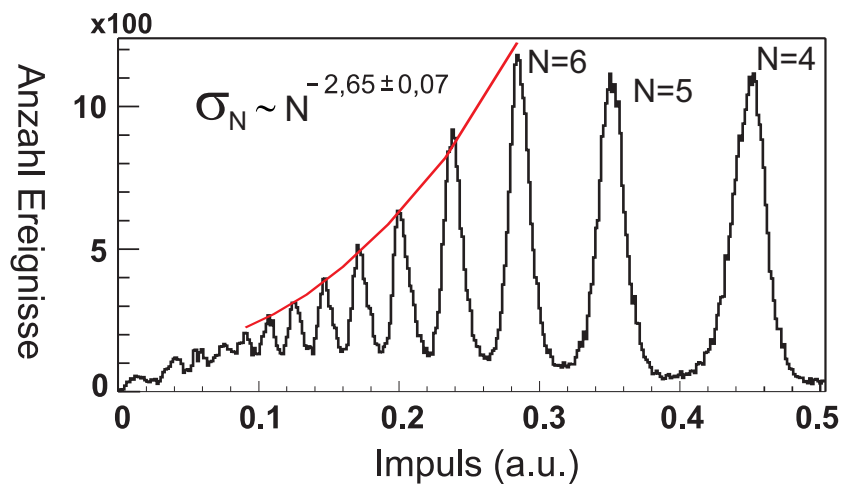


Abbildung 7.3: Spektrum der Elektronenimpulse bei einer Photonenenergie von 78,82 eV. Die Peakhöhen von  $N=4$  und  $N=5$  sind im Vergleich zu den anderen Peaks zu niedrig, da das Spektrometer für diese schnellen Ereignisse nicht mehr eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  aufwies - d.h. diese Reaktionskanäle wurden nur mit verminderter Effizienz nachgewiesen (siehe Seite 76). Die partiellen Wirkungsquerschnitte  $\sigma_N$  skalieren näherungsweise proportional zu  $N^{-2.65}$ .

### Die Autokorrelationsfunktion

Die Ähnlichkeit der Kurven untereinander wird auch in einer anderen Form der Darstellung deutlich. Für jede Kurve  $\sigma_N(E_\gamma)$  kann die sogenannte Autokorrelationsfunktion  $C_N(\Delta E)$  berechnet werden [74].

$$C_N(\Delta E) = \frac{1}{\bar{\sigma}_N^2} \int_{E_1}^{E_2} \left( \sigma_N(E + \Delta E) - \bar{\sigma}_N \right) \left( \sigma_N(E) - \bar{\sigma}_N \right) dE \quad (7.1)$$

wobei  $\bar{\sigma}$  der Mittelwert des Wirkungsquerschnittes zwischen  $E_1$  und  $E_2$  ist.

Diese Funktion wurde vor ca. 50 Jahren in der Kernphysik angewendet, um die Wirkungsquerschnitte von Compoundkernreaktionen zu interpretieren. Falls viele Resonanzen so dicht gedrängt beieinanderliegen, daß ihr mittlerer Abstand kleiner als ihre mittlere Breite wird und falls die Phasen dieser Resonanzen zufällig verteilt sind, so sollte nach Überlegungen von Ericson [73, 74] der Wirkungsquerschnitt  $\sigma(E)$  statistische Fluktuationen aufweisen. Im Idealfall nimmt dann die Autokorrelationskurve der Wirkungsquerschnitte die Form einer Lorentzkurve an (Abb. 7.4). Aus der Halbwertsbreite  $\Gamma$  wurde damals auf die Lebensdauer von Compoundsystemen geschlossen.

Auch im vorliegenden Fall sind die Abstände der Resonanzen kleiner als ihre mittleren Breiten. Die Wirkungsquerschnitte weisen jedoch zumindest im unteren Energiebereich unterhalb von 78,45 eV noch regelmäßige Strukturen auf. Fluktuationen, wie sie von Ericson diskutiert wurden, liegen hier somit (noch) nicht vor. Die Autokorrelationsfunktionen  $C_{N=4}(\Delta E)$  bis  $C_{N=8}(\Delta E)$  aus diesem Energiebereich sind in Abbildung 7.5 dargestellt. Diese Kurven beinhalten zwar keine zusätzliche Information - sie zeigen aber deutlich, daß in diesem Energiebereich trotz vieler interferierender Resonanzen noch keine Anzeichen von chaotischem Verhalten auftreten. Falls also Ericson-Fluktuationen in den Spektren der Einfachionisation von Helium auftreten, so müssen sie oberhalb von 78,5 eV gesucht werden.

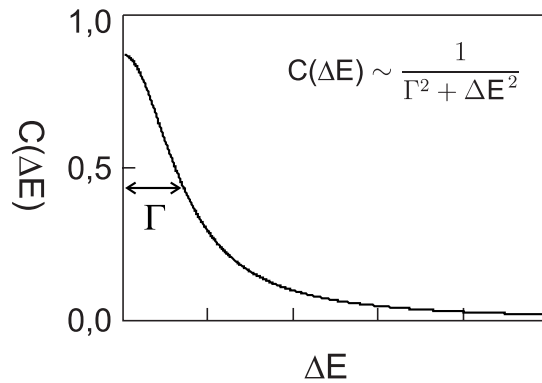


Abbildung 7.4: Beispiel einer Lorentzkurve mit der Halbwertsbreite  $\Gamma$ . In der Kernphysik wird über  $\Gamma$  die Lebensdauer von Compoundsystemen ermittelt.

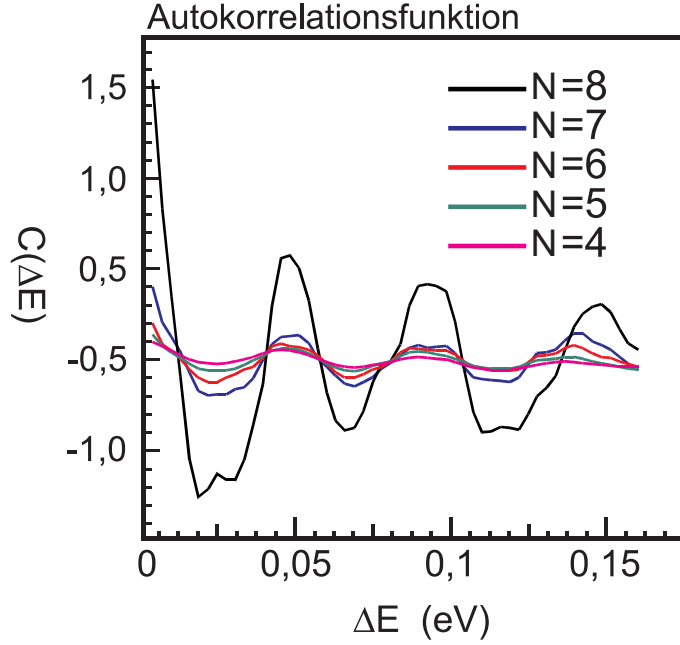


Abbildung 7.5: Die Autokorrelationsfunktionen (Gl. 7.1) für verschiedene partielle Wirkungsquerschnitte  $\sigma_N(E)$  in der Region unterhalb von 78,45 eV.

### 7.1.1 Vergleich der partiellen Wirkungsquerschnitte mit theoretischen Rechnungen (Rost *et al.*)

Es existiert bislang eine Veröffentlichung [64], die theoretische Rechnungen<sup>1</sup> zu partiellen Wirkungsquerschnitten in der hier betrachteten Energieregion beinhaltet.

In den Abbildungen 7.6, 7.7 und 7.8 sind die Ergebnisse von Experiment und Theorie überlagert dargestellt. Die theoretischen Daten wurden entsprechend der Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV (FWHM), die während des Experiments verwendet wurde, geglättet, d.h. sie wurden mit einer Gaußverteilung der Breite 3,9 meV (FWHM) gefaltet. Zusätzlich zu der Photonenenergieauflösung wurde auch die Schrittweite von 3 meV berücksichtigt. Das Ergebnis ist daher nicht nur eine Glättung der Kurven, sondern auch eine Verbreiterung. Im Falle von vollständiger Übereinstimmung zwischen Theorie und Messung, müßten die Kurvenzüge der experimentellen Daten (schwarz) innerhalb der Breite dieser theoretischen Kurven (blau) liegen. Die Vorgehensweise bei der Anpassung der theoretischen Ergebnisse auf die experimentellen Bedingungen ist in Anhang C auf Seite 115 detailliert beschrieben. Die ungefalteten theoretischen Daten sind in Abbildung 7.9 zusammen mit den geglätteten Kurven aufgetragen.

<sup>1</sup>Diese Rechnung basiert auf einer modernen Form der R-Matrix-Methode, die auf Seite 19 skizziert wird.

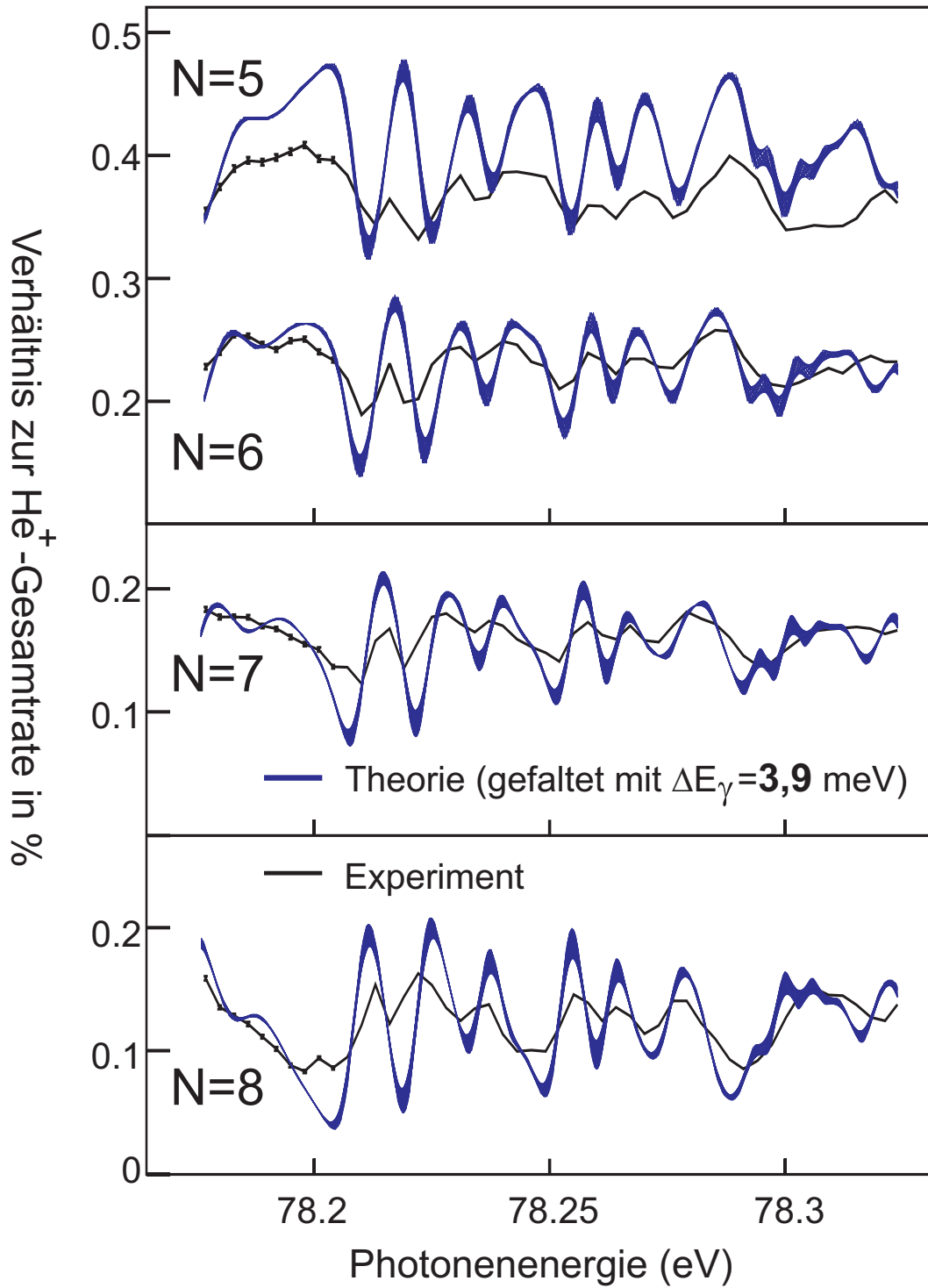


Abbildung 7.6: Absoluter Vergleich zwischen Theorie (blau) und Experiment (schwarz). Die theoretischen Daten wurden mit der experimentellen Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV (FWHM) gefaltet. Zudem wurden sie horizontal um  $-7,5$  meV verschoben. Die experimentellen Daten für  $N=5$  fallen etwas zu gering aus, da das Spektrometer für diese Reaktionen nicht mehr eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  aufweist. Am Anfang jeder Kurve sind die statistischen Fehlerbalken eingezeichnet.



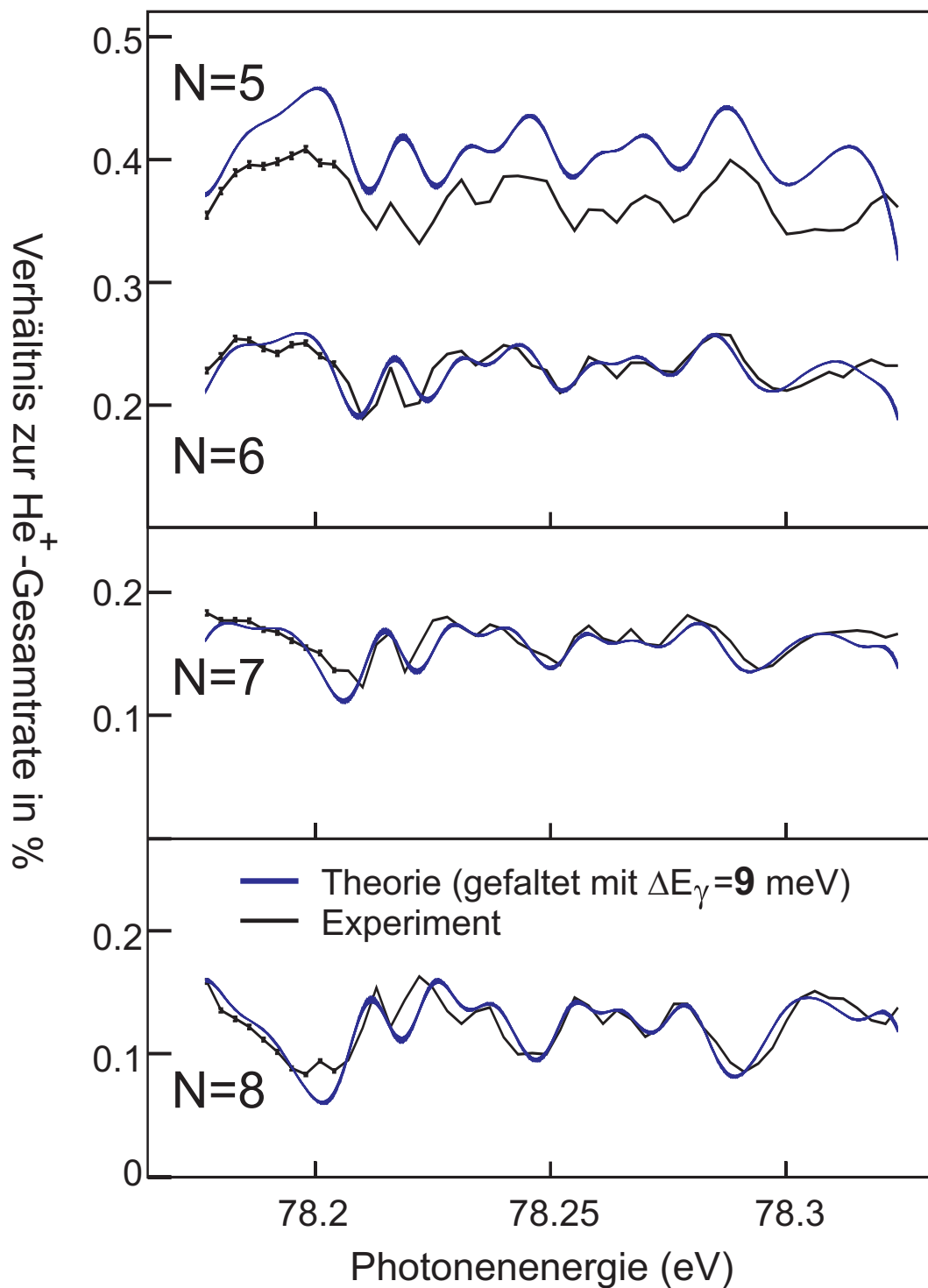


Abbildung 7.7: Vergleich zwischen Theorie (blau) und Experiment (schwarz). Für diese Darstellung wurden die theoretischen Daten stärker geglättet als in Abb. 7.6. Dadurch wird interessanterweise eine bessere Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht. Es muß aber betont werden, daß die experimentelle Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 3,9 \text{ meV}$  durch eine unabhängige Kalibrierungsmessung bestätigt wurde (S. 65). Die theoretischen Daten wurden horizontal um  $-7,5 \text{ meV}$  verschoben. Die experimentellen Daten für  $N=5$  fallen etwas zu gering aus, da das Spektrometer für diese Reaktionen nicht mehr eine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  aufweist. Am Anfang jeder Kurve sind die statistischen Fehlerbalken eingezeichnet.

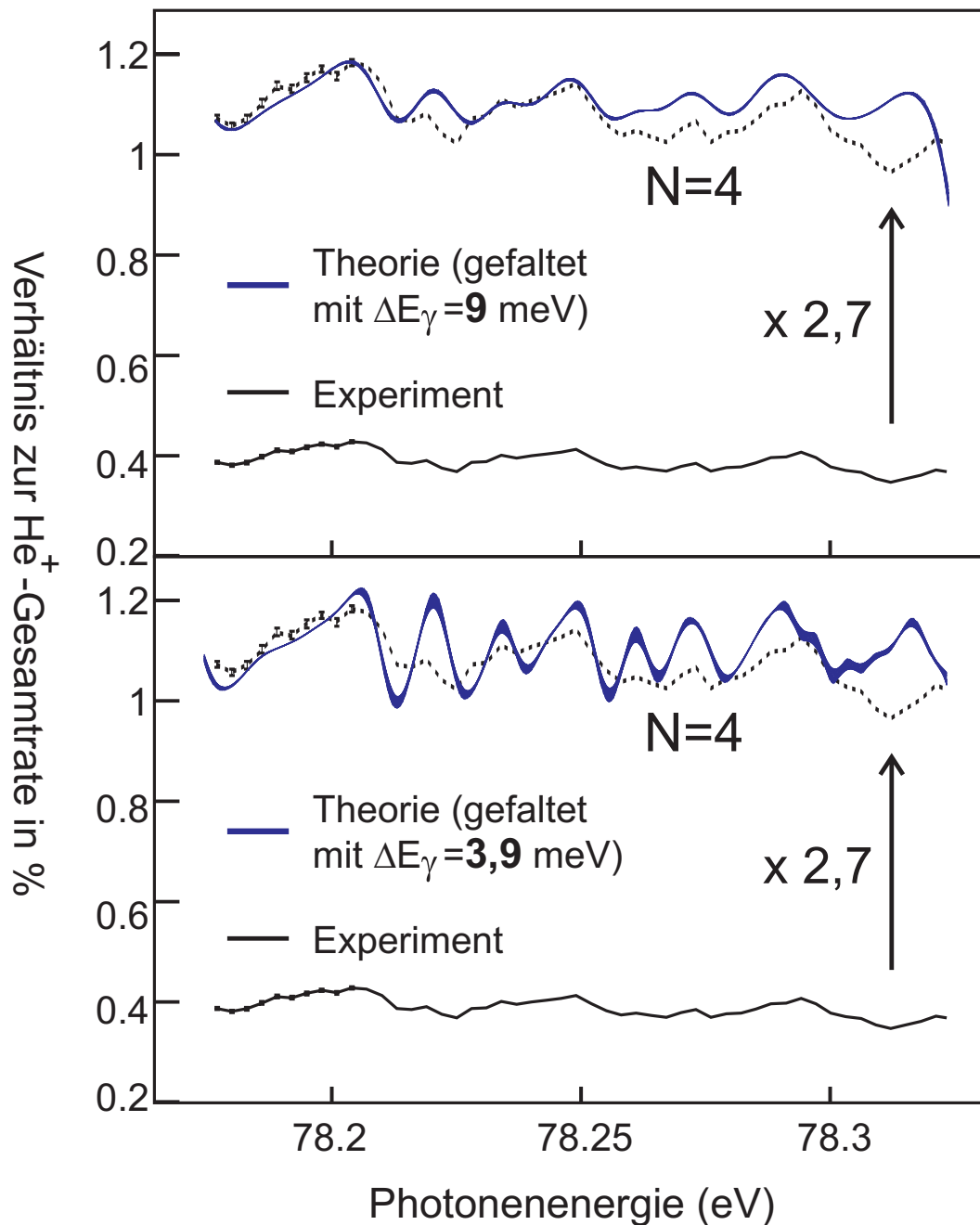


Abbildung 7.8: Vergleich zwischen Theorie (blau) und Experiment (schwarz). Die theoretischen Daten wurden mit der experimentellen Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV (FWHM) gefaltet (unteres Bild). Im oberen Bild sind die gleichen Daten dargestellt - jedoch mit einer Faltung von  $\Delta E_\gamma = 9$  meV (FWHM). Die theoretischen Kurven wurden horizontal um  $-7,5$  meV verschoben. Da das Spektrometer für diesen Reaktionskanal keine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  aufweist, fallen die gemessenen Wirkungsquerschnitte zu gering aus (Faktor  $\sim 2,7$ ). Die gestrichelte Kurve ergibt sich durch Multiplizieren der gemessenen Wirkungsquerschnitte mit der Zahl 2,7. Zu höheren Photonenenergien nimmt die Raumwinkelakzeptanz ab. Das erklärt das leichte Abfallen der experimentellen Kurve. Am Anfang der experimentellen Kurve sind die statistischen Fehlerbalken eingezeichnet.

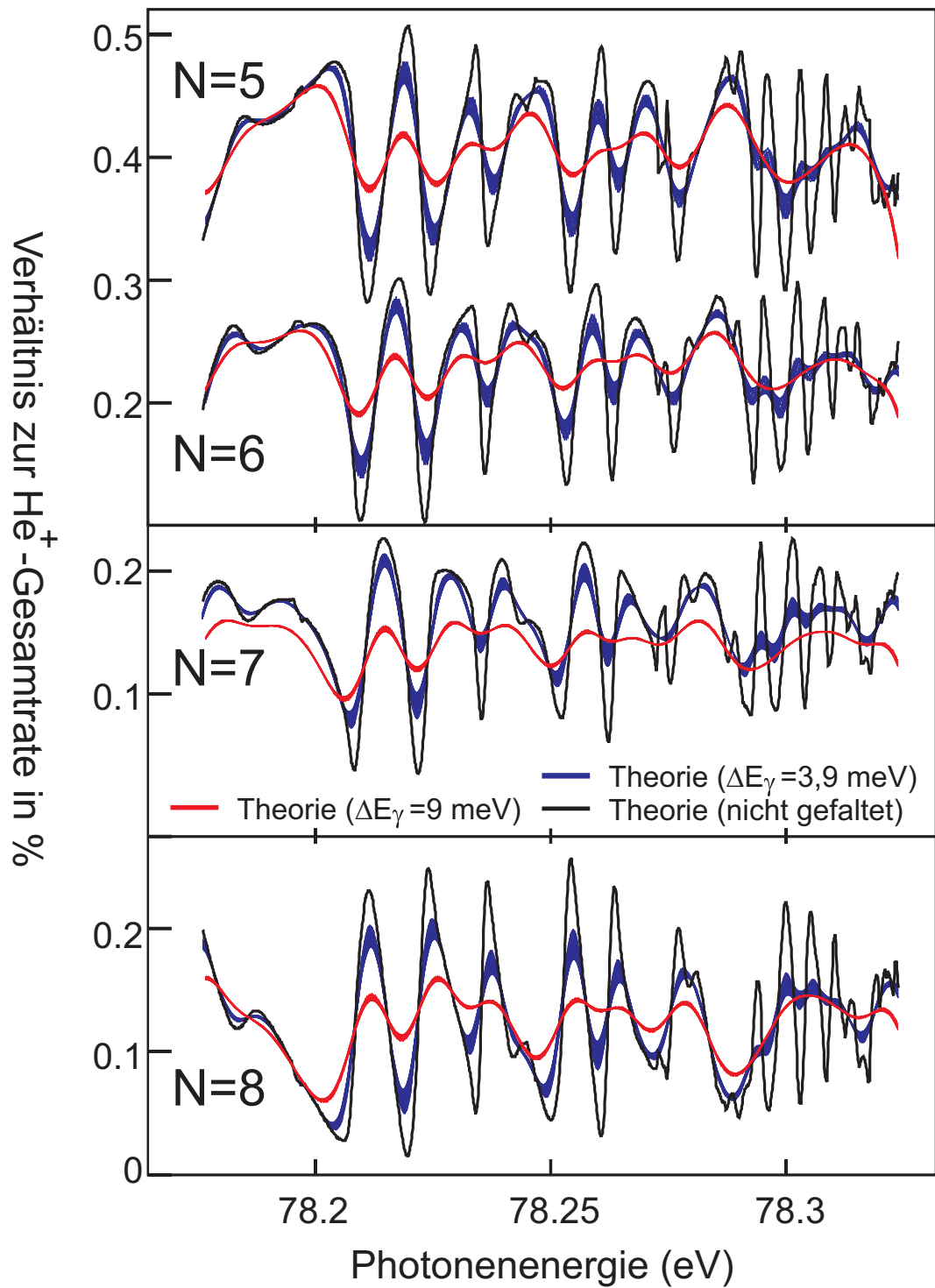


Abbildung 7.9: Die theoretischen Daten vor (schwarz) und nach (blau) der Faltung mit der Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV (FWHM). Die roten Kurven entsprechen einer Glättung (Faltung) mit  $\Delta E_\gamma = 9$  meV (FWHM). Während des Experiments wurde eine Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma < 3,9$  meV (FWHM) gewählt. Die Vorgehensweise bei der Faltung der theoretischen Daten ist in Anhang C beschrieben.

In Abbildung 7.7 wurden die theoretischen Daten mit einer Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma = 9$  meV (FWHM) gefaltet. Die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ist in diesem Fall besser. Es muß aber betont werden, daß anhand einer unabhängigen Kalibrierungsmessung (Seite 5.3.7) sichergestellt wurde, daß die Photonenenergieauflösung nicht schlechter als  $\Delta E_\gamma = 3,9$  meV (FWHM) ist. Die Ursache für die gute Übereinstimmung mit  $\Delta E_\gamma = 9$  meV liegt daher höchstwahrscheinlich auf der Seite der theoretischen Rechnungen.

Die theoretischen Daten wurden horizontal um  $-7,5$  meV, d.h. zu niedrigeren Photonenenergien hin, verschoben, um eine maximale Übereinstimmung zwischen den Peakpositionen zu erreichen.

Zunächst können die Mittelwerte der Wirkungsquerschnitte verglichen werden. Hier stimmt die Messung mit den theoretischen Vorhersagen sehr gut überein. Die große Abweichung zwischen Theorie und Experiment im Reaktionskanal  $N=4$  kann durch die verminderte Raumwinkelakzeptanz erklärt werden, die hier nicht mehr  $4\pi$  beträgt (siehe Abschnitt „Systematische Fehler“ 6.2). Die Raumwinkelakzeptanz nimmt zu höheren Photonenenergien ab. Dieser Effekt wird in den experimentellen Daten für  $N=4$  sichtbar, da er ein stetiges Abfallen der Kurve verursacht. Auch im Fall von  $N=5$  wird keine Raumwinkelakzeptanz von  $4\pi$  erreicht. Daher liegt die entsprechende Kurve etwas zu niedrig.

Im Bereich unterhalb von  $78,3$  eV stimmen die berechneten Positionen der Peaks mit den experimentellen Daten weitgehend überein. Die relativen Peakhöhen weichen jedoch signifikant voneinander ab (Abb. 7.6). Wie bereits oben erwähnt stimmen die theoretischen Kurven interessanterweise besser mit den experimentellen Befunden überein, wenn sie stärker geglättet werden.

Bei früheren Gegenüberstellungen zwischen experimentellen Daten und theoretischen Rechnungen war die Übereinstimmung ausnahmslos sehr gut [55, 56]. Dies ist bei den vorliegenden Daten nicht der Fall. Das zeigt, daß nun erstmals eine Region im Energiespektrum experimentell zugänglich geworden ist, in der grundsätzlich Neues erwartet werden kann.

## 7.2 Winkelverteilungen ( $\beta$ -Parameter)

Für jedes nachgewiesene Elektron kann aus den Impulskomponenten die Emissionsrichtung ermittelt werden. In Abschnitt 6.1 (Seite 75) wurde beschrieben, wie die Form der gemessenen Winkelverteilungen anhand des  $\beta$ -Parameters durch die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(E_\gamma, \theta)}{d\Omega} &= \frac{\sigma_{total}(E_\gamma)}{4\pi} \left( 1 + \beta(E_\gamma) P_2(\cos(\theta)) \right) \\ \text{mit } P_2(\cos(\theta)) &= \frac{3}{2} \cos^2(\theta) - \frac{1}{2} \quad (2. \text{ Leg. Polynom}) \end{aligned} \quad (7.2)$$

ausgedrückt werden kann. Aus den Daten wurde für jeden Reaktionskanal  $He_{(N)}^+$  der  $\beta$ -Parameter extrahiert und gegen die Photonenenergie aufgetragen. Sie sind in den Abbildungen 7.10 und 7.11 (Seite 90 und 91) dargestellt. Zusätzlich sind die dazugehörigen partiellen Wirkungsquerschnitte  $\sigma_N$  in willkürlichen Einheiten eingezeichnet. An einigen Stellen sind Fehlerbalken eingetragen. Ihre Größe ergibt sich direkt durch Anfitten der Funktion 7.2 an die Winkelverteilung. In dem Intervall zwischen 78,5 eV und 78,815 eV wurde aus Zeitgründen mit einer reduzierten Meßdauer gearbeitet. Aus diesem Grund sind in diesem Bereich die Fehlerbalken größer.

Vor allem bei den Reaktionskanälen N=6 bis N=9 ist unterhalb von 78,45 eV eine Korrelation zwischen dem  $\beta$ -Parameter und den partiellen Wirkungsquerschnitten sichtbar. Ein ähnliches Verhalten haben bereits Zubek *et al.* [52] im Reaktionskanal  $He_{(N=2)}^+$  (Abb. 3.3, Seite 27) und später Menzel *et al.* [56] für  $He_{(N<5)}^+$  nachgewiesen (Abb. 3.5 auf Seite 29).

Die Endzustände  $He_{(N)}^+$  setzen sich zusammen aus den nahezu entarteten Zuständen  $Ns, Np, \dots$ , d.h.  $\ell = 0, 1, \dots, N-1$ . Jeder dieser Zustände trägt gewichtet nach seinem Wirkungsquerschnitt über

$$\beta_N = \frac{\sum_{\ell=0}^{N-1} \sigma_{N,\ell} \beta_{N,\ell}}{\sum_{\ell=0}^{N-1} \sigma_{N,\ell}} \quad (7.3)$$

zur gemessenen Winkelverteilung  $\beta_N$  bei. Aufgrund der Drehimpulserhaltung gilt grundsätzlich  $\beta_{N,\ell=0} = 2$ . Damit kann der Verlauf der Winkelverteilungen teilweise interpretiert werden.

Die Winkelverteilungen in den Abbildungen 7.10 und 7.11 weisen einen gemeinsamen Trend auf. Der  $\beta$ -Parameter beginnt jeweils bei einem niedrigen Wert und steigt nach höheren Energien hin an. Dieses Verhalten haben bereits Lindle *et al.* [53] und Zubek *et al.* [52] im Fall von  $He_{(N=2)}^+$  beobachtet. Als Erklärung dafür wurde damals ein Absinken des  $\sigma_{2p}/\sigma_{2s}$ -Verhältnisses und ein Ansteigen des  $\beta_{2p}$ -Parameters genannt<sup>2</sup>. Menzel *et al.* [56] haben dieses Verhalten auch bei höheren Zuständen ( $N < 5$ ) beobachtet, sie geben jedoch keine weitergehende Interpretation an.

---

<sup>2</sup>Die ausführliche Diskussion ist in [53] enthalten.

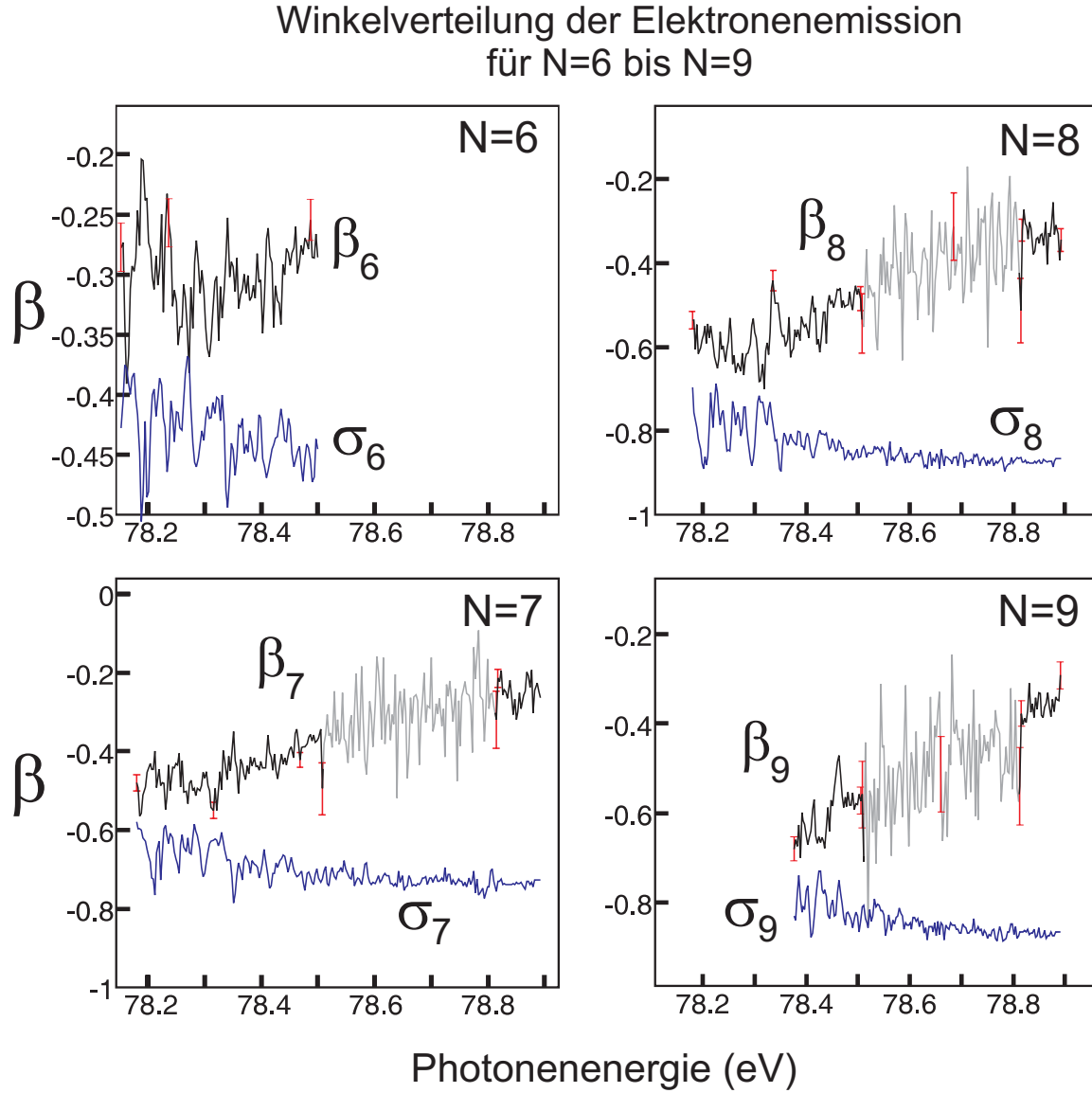


Abbildung 7.10: Die Winkelverteilungen der einzelnen Reaktionskanäle ausgedrückt durch den  $\beta$ -Parameter (schwarz/graue Kurven). Zusätzlich ist der partielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma_N$  in willkürlichen Einheiten eingetragen (blaue Kurven), um gemeinsame Strukturen vergleichen zu können. An einigen Stellen sind Fehlerbalken (rot) eingetragen. Sie sind in der Region zwischen 78,5 eV und 78,815 eV (grau) recht groß, da hier pro Energieschritt weniger Daten aufgenommen wurden.

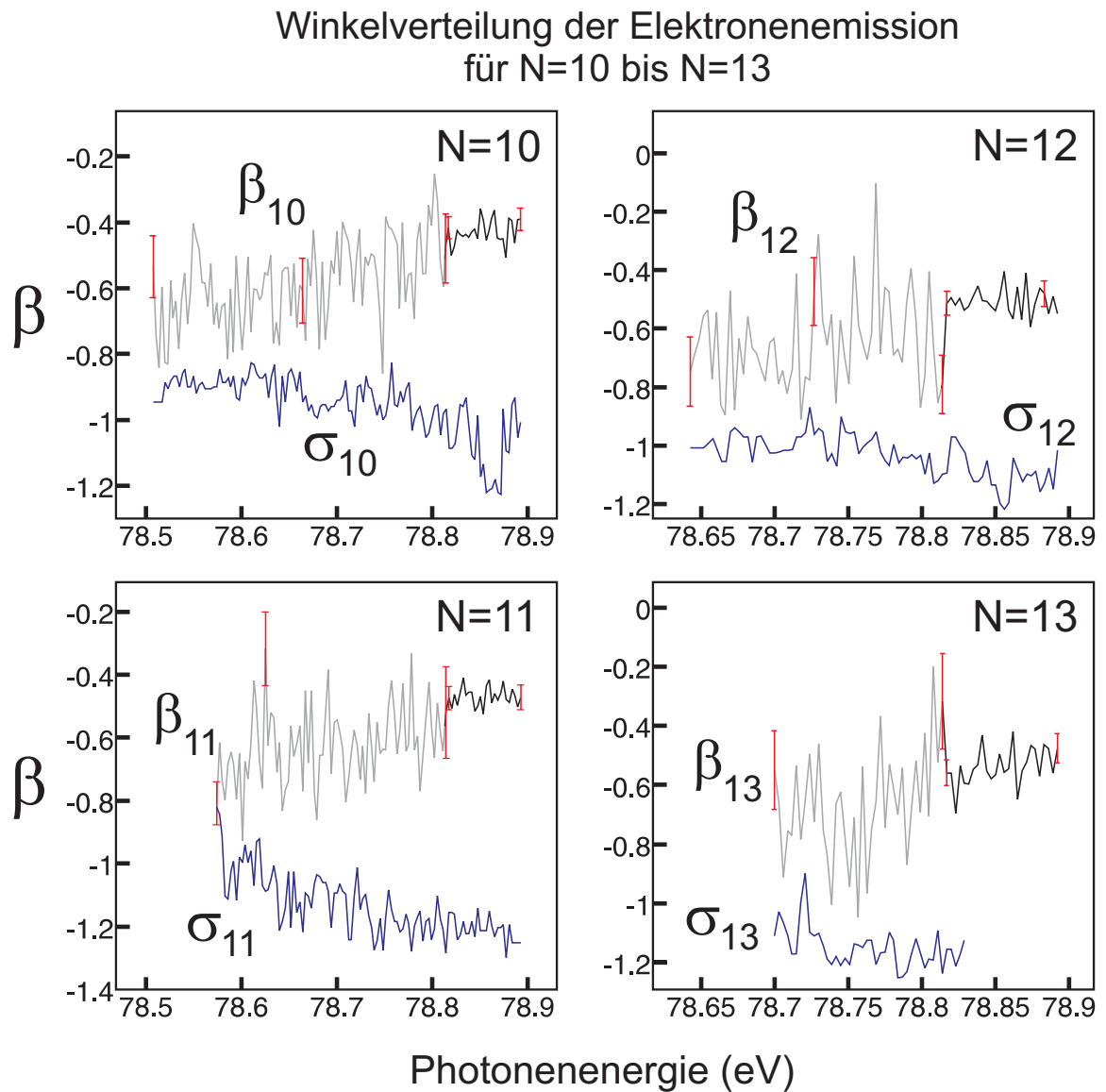


Abbildung 7.11: Die Winkelverteilungen der einzelnen Reaktionskanäle ausgedrückt durch den  $\beta$ -Parameter (schwarz/graue Kurven). Zusätzlich ist der partielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma_N$  in willkürlichen Einheiten eingetragen (blaue Kurven). Hier sind keine gemeinsamen Strukturen zwischen den  $\beta$ -Parametern und den dazugehörigen partiellen Wirkungsquerschnitten  $\sigma_N$  mehr zu erkennen. An einigen Stellen sind Fehlerbalken (rot) eingetragen. Sie sind in der Region zwischen 78,5 eV und 78,815 eV (grau) recht groß, da hier pro Energieschritt weniger Daten aufgenommen wurden.

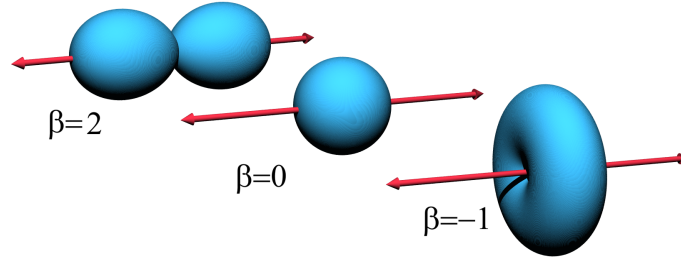


Abbildung 7.12: Winkelverteilungen der Elektronenemission für verschiedene Werte von  $\beta$ . Der  $\beta$ -Parameter wird in Abschnitt 2.4 auf Seite 20 besprochen.

### 7.2.1 Vergleich mit theoretischen Rechnungen von Greene

In der Abbildung 7.10 fällt auf, daß der  $\beta_N$ -Parameter mit steigenden  $N$  abfällt.  $\beta_{N=8}$  beginnt beispielsweise bei  $\beta=-0,6$  wohingegen  $\beta_{N=13}$  anfänglich bei ca.  $\beta=-0,8$  liegt. Wie oben bereits erwähnt haben alle Kurven die gemeinsame Eigenschaft, daß sie zu höheren Energien hin ansteigen. Für einen Vergleich ihrer Absolutpositionen ist es daher sinnvoll, den Mittelwert des  $\beta$ -Parameters jeweils im unteren Bereich zu bilden, d.h. unmittelbar hinter der jeweiligen Schwelle  $I_N$ . Für diese Mittelwerte existieren theoretische Vorhersagen.

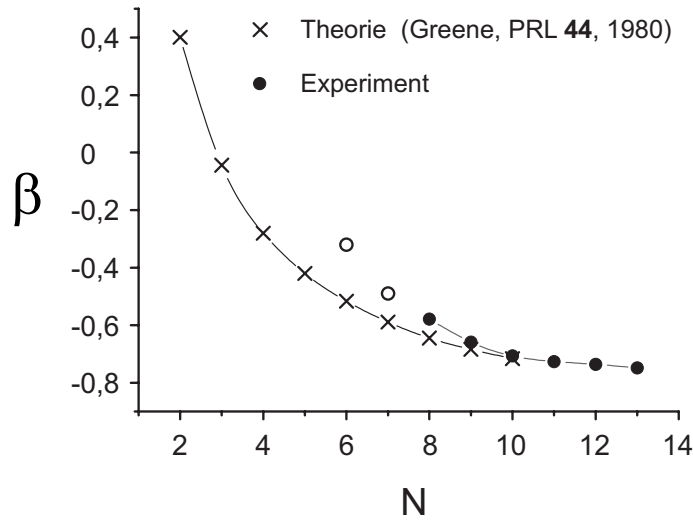


Abbildung 7.13: Vergleich der gemessenen Daten mit Vorhersagen von C. H. Greene [61]. Nach Greene sollte  $\beta$  für hohe  $N$  gegen  $\beta = -1$  konvergieren. Die Fehlertoleranz in den experimentellen Daten ist kleiner als die schwarzen Kreise. Die experimentellen Werte für  $N=6$  und  $N=7$  können nicht direkt mit den theoretischen Vorhersagen verglichen werden, daher sind sie speziell markiert (siehe Seite 93).

In Abbildung 7.13 sind die durchschnittlichen  $\beta$ -Parameter gegen  $N$  aufgetragen und mit Vorhersagen von Greene [61] verglichen. Greene hat für die Reaktionskanäle mit  $N=2$  bis  $N=10$  die Mittelwerte der  $\beta$ -Parameter unmittelbar hinter der jeweiligen



Schwelle berechnet und festgestellt, daß sie für  $N \rightarrow \infty$  gegen  $\beta = -1$  konvergieren. Die Abweichung von  $\beta = -1$  soll dabei proportional zu  $N^{-1}$  sein.

Greene konnte zeigen, daß der Zerfall von autoionisierenden doppelt angeregten Zuständen mit den Quantenzahlen  $T=0$  und  $T=1$  zu sehr unterschiedlichen Emissionsverteilungen der emittierten Elektronen führt. Im Fall von  $T=0$  sollte für  $N \rightarrow \infty$  die Winkelverteilung der emittierten Elektronen dem  $\beta$ -Parameter  $\beta = 2$  entsprechen. Die Anregung dieser Zustände ist jedoch sehr unwahrscheinlich. Daher werden bei der Messung fast ausschließlich Zerfälle von Zuständen mit  $T=1$  nachgewiesen, für die nach Greenes Vorhersagen  $\beta_{N \rightarrow \infty} \rightarrow -1$  gelten soll.

Abbildung 7.13 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen diesen Rechnungen und den experimentellen Daten. Greene schränkt die Gültigkeit seiner Aussagen auf niederenergetische Elektronen ein, d.h. seine Vorhersagen bezüglich der  $\beta_N$ -Parameter gelten nur jeweils in den Regionen unmittelbar hinter den jeweiligen Schwellen für  $He_{(N)}^+$ .

Die experimentellen Daten beginnen erst oberhalb der Schwelle für  $He_{(N=8)}^+$ . Die in der Abbildung eingetragenen Werte für  $\beta_{(N=6)}$  und  $\beta_{(N=7)}$  wurden demnach weit entfernt von den dazugehörigen Schwellen ermittelt und liegen daher aufgrund des allgemeinen Ansteigens der Kurven zu hoch. Das erklärt die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment bei  $N=6$  und  $N=7$ .

### 7.2.2 Vergleich mit der Doppelionisation über 79 eV

Dörner *et al.* [62] haben die Doppelionisation von Helium bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma=80,1$  eV untersucht, d.h. ca. 1,1 eV über der Doppelionisationsschwelle. Bei diesem Experiment wurde ebenfalls linear polarisierte Synchrotronstrahlung verwendet.

In Abbildung 7.14 sind die Ergebnisse dieser Messung dargestellt. Es sind nur diejenigen Ereignisse berücksichtigt, bei denen die Impulsvektoren der Teilchen innerhalb der Ebene liegen, die senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Lichts orientiert ist. Bei diesem Dreiteilchenaufbruch bewegt sich der  $He^{2+}$ -Kern bevorzugt in die Richtung, die durch den Polarisationsvektor des Lichts ausgezeichnet ist. Aufgrund der Impulserhaltung muß der gemeinsame Massenschwerpunkt der Elektronen den entgegengesetzten Impuls aufnehmen. Die Relativbewegung zwischen den Elektronen zeigt eine Ausrichtung, die senkrecht zur Bewegung des Kerns orientiert ist (Abb. 7.14).

Dieses Verhalten kann durch eine klassische Betrachtung des Dreiteilchensystems interpretiert werden. Die Kinematik der Reaktion wird im gemeinsamen Bezugssystem der Elektronen betrachtet (siehe Abbildung 7.15). Doppelionisation ist nur dann möglich, wenn sich der Kern seitlich aus dem gemeinsamen Potential der Elektronen herausbewegt. Anderenfalls fiele er in eines der beiden Potentialminima. Dabei würde nur ein sehr schnelles Elektron frei werden, das fast die gesamte kinetische Energie davonträgt und ein  $He^+$ -Ion zurückläßt, d.h. eine Einfachionisation<sup>3</sup> wäre die Folge.

---

<sup>3</sup>Dieser Prozeß ist tatsächlich bei weitem der wahrscheinlichere.

Dieses Bild kann auch auf die Situation unmittelbar unterhalb der Doppelionisationsschwelle übertragen werden. Hier reicht die Gesamtenergie zwar nicht aus, um den Kern aus dem Potential beider Elektronen zu entfernen. Anfänglich sind sich beide Prozesse jedoch sehr ähnlich, da sich beide Elektronen in großer Entfernung zum Kern befinden.

Die Zerfall von doppelt hoch angeregten Zuständen, der zu hoch angeregten  $He^+$ -Ionen führt, kann in diesem Bild als verhinderte Doppelionisation angesehen werden (blauer Pfeil in Abb. 7.15). Die Winkelverteilungen der emittierten Elektronen ähneln daher sehr den Verteilungen, die bei der Doppelionisation dicht oberhalb von 79 eV beobachtet wurden  $\beta \sim -1$ .

Auch hier läßt sich argumentieren, daß hoch angeregte Endzustände des  $He^+$ -Ions nur dann bevölkert werden können, wenn die Elektronen senkrecht zur Polarisationsachse orientiert sind (d.h.  $\beta \sim -1$ ). Anderenfalls würde er tief in eines der Potentialminima fallen, was eher einen niedrig angeregten Zustand zur Folge hätte. Das erklärt zumindest qualitativ das beobachtete Verhalten, daß  $\beta$  für hohe N gegen  $\beta=-1$  strebt und für niedrige N eher eine Dipolverteilung ( $\beta = 2$ ) annimmt.

Abschließend soll noch auf die geringe Größe der Fehlerbalken in den Abbildungen 7.10 und 7.11 hingewiesen werden. Die Größe der Fehlerbalken ist ein Maß dafür, wie gut die Winkelverteilungen durch die Gleichung beschrieben werden können, der die  $\beta$ -Parameter zugrunde liegen. Ihre geringe Größe deutet darauf hin, daß die Winkelverteilungen durch Gl. 7.2 sehr gut ausgerückt werden und offensichtlich keine Strukturen vorhanden sind, die darüber hinaus gehen. Bei allen bisherigen Messungen wurde dies als gegeben angesehen und bei der Auswertung der Daten verwendet - es wurde aber nie explizit überprüft.

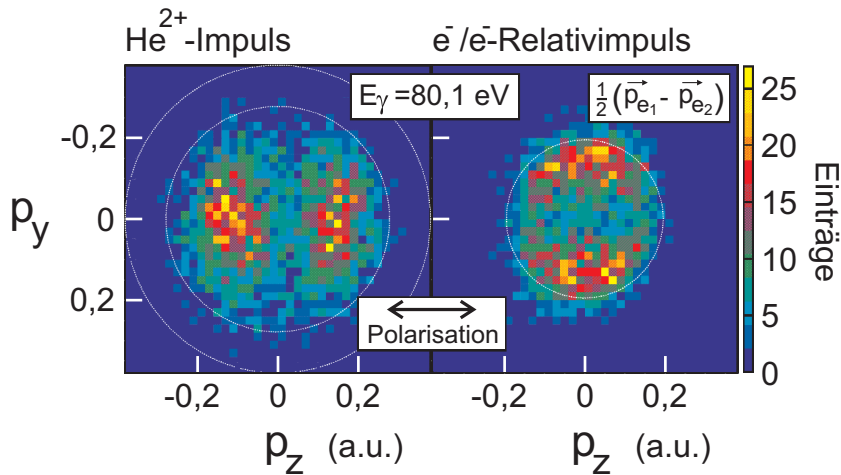


Abbildung 7.14: Dörner *et al.* [62] haben die Doppelionisation von Helium bei einer Photonenenergie von  $E_\gamma=80,1$  eV untersucht, d.h. ca. 1,1 eV über der Doppelionisationsschwelle. Dargestellt sind die Impulsverteilungen des  $He^{2+}$ -Ions und die Relativimpulse der Elektronen. Im Text werden diese Ergebnisse mit den dicht unterhalb der Doppelionisationsschwelle aufgenommenen Daten verglichen (S. 93).

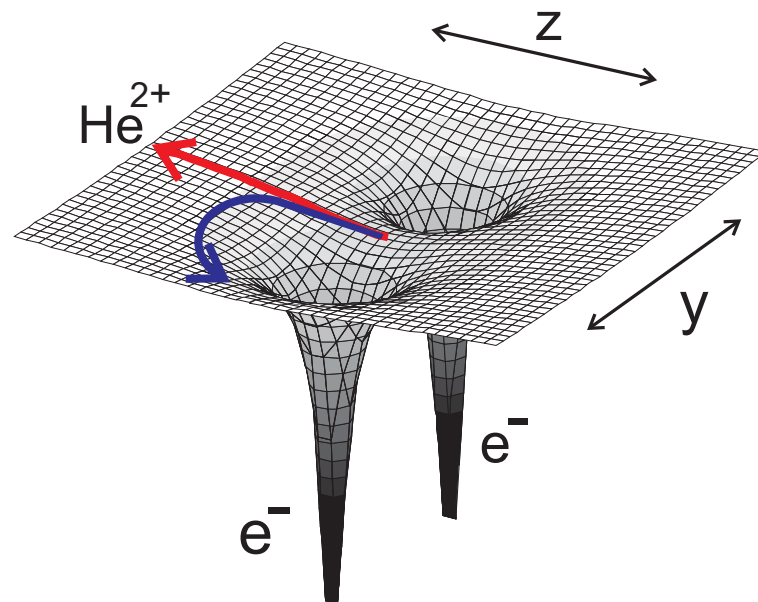


Abbildung 7.15: Die Ionisation im Sattelpunktsbild von Wannier. Hier wird angenommen, daß die Elektronen nahezu ruhen und sich der Kern in ihrem gemeinsamen Potential bewegt. Doppelionisation mit sehr niedrigen Energien (rot) bzw. Einfachionisation, bei der das  $\text{He}^+$ -Ion in einem hoch angeregten Zustand zurückbleibt (blau), kann nur erfolgen, wenn der Kern sich seitlich aus dem Potential der Elektronen herausbewegt. Die Bewegung des Kerns wird jedoch durch das elektrische Feld des Photons festgelegt und findet daher bevorzugt entlang der Achse des Polarisationsvektors statt. Daraus folgt, daß die Relativbewegung der Elektronen vorwiegend senkrecht zum Polarisationsvektor orientiert ist ( $\beta \sim -1$ ).

# Kapitel 8

## Zusammenfassung und Ausblick

Das Spektrum der Einfachionisation von Helium unterhalb der Doppelionisationsschwelle bei  $E_\gamma=79$  eV ist reich an komplexen Strukturen. Eine Vielzahl von Resonanzen tritt auf, die in Form von verschiedenen Serien organisiert sind. Diese Resonanzen sind unmittelbar verbunden mit doppelt angeregten Zuständen von Helium. Synchrotronstrahlung ist für solche Untersuchungen ideal geeignet. Die Energie der Photonen, d.h. die Energie, mit der auf das Heliumatom eingewirkt wird, kann hierbei auf wenige meV exakt eingestellt werden. Innerhalb der letzten vier Jahrzehnte ist eine Fülle von experimentellen und theoretischen Arbeiten entstanden, die das genauere Verständnis dieser doppelt angeregten Zustände und den dahinterliegenden Elektronenkorrelationen zum Ziel haben. Dabei wurden auf der experimentellen und auf der theoretischen Seite große Fortschritte erzielt. In deutlichem Abstand von der Doppelionisationsschwelle herrscht zwischen Theorie und Experiment weitgehend Übereinstimmung. Das trifft allerdings nicht auf den Bereich dicht unterhalb der Doppelionisationsschwelle zu, d.h. zwischen ca.  $E_\gamma=78,2$  eV und  $E_\gamma=79$  eV. In dieser Region ist der Überlapp zwischen verschiedenen Resonanzen so stark, daß sie nicht mehr getrennt werden können und die bis dahin verwendeten Quantenzahlen ihre Gültigkeit verlieren. Da das klassisch betrachtete Heliumatom höchst instabil ist und einen weitestgehend chaotischen Phasenraum aufweist, stellt sich die Frage, ob davon nicht auch Anzeichen in den doppelt hoch angeregten Zuständen nahe der Doppelionisationsschwelle zu finden sind. Dieses Gebiet ist sowohl theoretisch als auch experimentell nahezu unerforscht.

Die Frage, ob in quantenmechanischen Dreiteilchensystemen ohne äußere Störung chaotisches Verhalten gefunden werden kann, ist bis heute offen.

Traditionelle experimentelle Methoden stoßen hier auf Hindernisse, die auch in Zukunft höchstwahrscheinlich nicht überwunden werden können. Das größte Problem sind sehr niedrige Wirkungsquerschnitte, die zu sehr geringen Reaktionsraten führen. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit ein neuer Weg gewählt, der diese Probleme weitgehend hinter sich läßt und Untersuchungen in dieser äußerst schwer zugänglichen Region ermöglicht. Die neue Technik weist gegenüber bisherigen Methoden eine um mehrere Größenordnungen gesteigerte Nachweiseffizienz auf, wodurch Messungen in diesem Energiebereich innerhalb eines vernünftigen Zeitrahmens praktisch erst ermöglicht werden. Erreicht wird dies durch ein Spektrometer, das zu allen Raumrichtungen hin sensitiv ist und die Impulse und Richtungen der emittierten Elektronen individuell

für jede einzelne Reaktion messen kann. Aufgrund der Energieerhaltung kann anhand der gemessenen kinetischen Energien der Elektronen und der eingestellten Energie der Photonen auf den Anregungszustand des zurückbleibenden  $He^+$ -Ions geschlossen werden. Die  $e^-/He^+$ -Paare, die infolge des Ionisationsprozesses entstehen, werden auf zwei getrennten Detektoren koinzident nachgewiesen. Dadurch kann der Untergrund in den gemessenen Daten sehr effizient herausgefiltert werden.

Die im Rahmen dieser Arbeit vorgestellte Meßmethode basiert auf der sogenannten COLTRIMS-Technik, die seit einigen Jahren im Bereich der Atom- und Molekülphysik äußerst erfolgreich eingesetzt wird. Ihre Anwendung auf niederenergetische Elektronen mit kinetischen Energien im Bereich zwischen 0-0,5 eV war bisher jedoch nur sehr eingeschränkt möglich und mit großen Unsicherheiten verbunden, da in diesem Fall die Einflüsse verschiedener Störquellen berücksichtigt werden müssen. Dies sind beispielsweise das Erdmagnetfeld, elektrostatische Aufladungseffekte an Oberflächen und die Produktion von Sekundärelektronen. Diese Probleme konnten gelöst werden, so daß nun auch winkelaufgelöste Messungen an Elektronen mit weniger als 100 meV kinetischer Energie möglich sind.

Die Apparatur wurde am Institut für Kernphysik in Frankfurt geplant und konstruiert. Am Berliner Synchrotron BESSY II wurde mit ihr erfolgreich eine Messung durchgeführt. Mit der Messung sollten verschiedene Ziele verfolgt werden. Zunächst wurde mit Hilfe von Testmessungen das Funktionieren des Meßprinzips überprüft. Solche Tests waren in Frankfurt nicht möglich, da hierzu Synchrotronstrahlung notwendig war.

Anschließend wurde innerhalb einer Region gemessen, für die veröffentlichte theoretische Rechnungen [64] vorliegen ( $E_\gamma=78,16$  eV bis  $E_\gamma=78,33$  eV). Im weiteren Verlauf der Messung wurde der gesamte Bereich bis  $E_\gamma=78,9$  eV abgedeckt.

Oberhalb einer Photonenenergie von  $E_\gamma=78,45$  eV sind in den gemessenen partiellen Wirkungsquerschnitten  $\sigma_N$  keine größeren Strukturen sichtbar, die mit der experimentellen Photonenenergieauflösung von  $\Delta E_\gamma=3,9$  meV aufgelöst werden können.

Da für die gesamte Messung nur 8 Tage zur Verfügung standen, mußten diese Bereiche relativ schnell durchschritten werden. Die Kurven, die die Ergebnisse der Messung darstellen, haben daher bei weitem nicht die Qualität, die mit diesem System erreichbar ist. Sie reicht jedoch für einen Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen aus (Abb. 7.6 auf Seite 84).

Zwischen den Positionen der einzelnen Peaks herrscht weitgehend Übereinstimmung. Das gleiche gilt für die durchschnittlichen Wirkungsquerschnitte. Hierbei ist die Übereinstimmung sogar sehr gut.

Die relativen Höhen der Peaks weichen jedoch voneinander ab. Aufgrund einer unabhängigen Kalibrierungsmessung kann ausgeschlossen werden, daß dieser Effekt durch eine zu grobe Energieauflösung verursacht wird.

In diesen theoretischen Rechnungen wurden lediglich die partiellen Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{He^+_{(N)}}(E_\gamma)$  betrachtet.  $\sigma_{He^+_{(N)}}(E_\gamma)$  ist dabei der Wirkungsquerschnitt für die Produktion von  $He^+$ -Ionen im angeregten Zustand mit der Hauptquantenzahl<sup>1</sup>  $N$  bei der Photonenenergie  $E_\gamma$ .

---

<sup>1</sup>Diese wasserstoffähnlichen Zustände sind nach der Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  nahezu entartet.

Die Winkelverteilungen<sup>2</sup>  $\beta_N(E_\gamma)$  und die Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{He^+(N)}(E_\gamma)$  sind offensichtlich korreliert: Kurven  $\beta_N(E_\gamma)$  und  $\sigma_N(E_\gamma)$ , die jeweils dem gleichen Reaktionskanal  $He^+(N)$  zugeordnet sind, weisen ähnliche Strukturen auf (Abb. 7.10 und 7.11). Zusätzlich zeigt sich, daß alle Kurven  $\beta_N(E_\gamma)$  zu höheren Photonenenergien  $E_\gamma$  hin ansteigen.

Beide Verhaltensweisen wurden auch in früheren Untersuchungen [52] am Zustand  $He^+(N=2)$  bei einer Photonenenergie zwischen 69 eV und 76,5 eV beobachtet. Als Erklärung dafür wurde damals ein Absinken des  $\sigma_{2p}/\sigma_{2s}$ -Verhältnisses und ein Ansteigen des  $\beta_{2p}$ -Parameters angeführt (S. 89). Dies ist der untere Teil des Spektrums, in dem Resonanzen noch gut getrennt und strukturiert auftreten. So eine einfache Interpretation ist im vorliegenden Fall bei beispielsweise  $N=13$  zwar nicht möglich. Es ist jedoch erstaunlich, ein ähnliches Verhalten auch noch in der Region oberhalb von 78 eV und bei weitaus höher angeregten Zuständen um  $He^+(N=13)$  wiederzufinden.

Die Kurven der  $\beta$ -Parameter  $\beta_N(E_\gamma)$  steigen zu höheren Photonenenergien hin zwar an. Die Absolutpositionen der einzelnen Kurven sinken jedoch mit ansteigendem  $N$ , d.h. die Kurve für  $\beta_{N=8}$  liegt beispielsweise unterhalb von  $\beta_{N=6}$  und so fort. Solch ein Verhalten wurde von Greene [61] vorhergesagt. Nach seinen Überlegungen gilt  $\lim_{N \rightarrow \infty}(\beta_N) = -1$ . Seine Voraussage stimmt mit den Ergebnissen der Messung sehr gut überein.

Dieses Verhalten kann mit der Doppelionisation [62] unmittelbar oberhalb der Doppelionisationsschwelle verglichen werden, da sich die Winkelverteilungen der emittierten Elektronen in beiden Fällen sehr ähneln (jeweils  $\beta \sim -1$ ). Im Rahmen einer anschaulichen klassischen Interpretation kann erklärt werden, warum die Winkelverteilungen der Elektronenemission für hohe  $N$  gegen  $\beta = -1$  streben (S. 93). In diesem Bild können solche Zerfälle von doppelt angeregten Zuständen, die ein hoch angeregtes  $He^+$ -Ion zur Folge haben, als „verhinderte“ Doppelionisationen angesehen werden.

In dieser Arbeit wurde die erste Messung von partiellen Wirkungsquerschnitten  $\sigma_N$  bis zum Endzustand  $He^+(N=16)$  beschrieben. Für die Reaktionskanäle bis einschließlich  $N=13$  wurden zudem die Winkelverteilungen  $\beta_N$  ermittelt. Diese Messung wäre aufgrund der geringen partiellen Wirkungsquerschnitte mit traditionellen Methoden nicht möglich gewesen.

In einer kürzlich veröffentlichten Messung [47] werden lediglich die partiellen Wirkungsquerschnitte unterhalb der  $He^+(N=7)$ -Schwelle vorgestellt, d.h. für die Endzustände  $N=1$  bis  $N=6$ . Die Qualität der Daten für den Reaktionskanal  $N=6$  ist jedoch nicht sehr gut, d.h. hier werden bereits die Grenzen der herkömmlichen Technik erreicht, obwohl der Wirkungsquerschnitt in diesem Fall noch ca. 25-fach stärker ist als beispielsweise vom Reaktionskanal  $N=13$ .

Dieser Vergleich unterstreicht die Vorzüge der hier vorgestellten Methode.

Im Bereich zwischen 78,5 eV und der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV wird erwartet, daß die Wirkungsquerschnitte sehr stark oszillieren. Solche Strukturen konnten im Rahmen der hier vorgestellten Messung nicht aufgelöst werden, da dies aufgrund

---

<sup>2</sup>Die Form der Winkelverteilungen können durch den dimensionslosen  $\beta$ -Parameter ausgedrückt werden (Seite 20).

der kurzen Meßdauer nicht möglich war. In zukünftigen Messungen müßten daher eine bessere Photonenenergieauflösung und kleinere Schrittweiten gewählt werden. An der Apparatur müssen zu diesem Zweck keine Verbesserungen vorgenommen werden.

Die Frage, ob im Heliumatom chaotisches Verhalten existiert, konnte auch in dieser Arbeit noch nicht beantwortet werden. Es wurde jedoch bewiesen, daß nun eine Meßmethode zur Verfügung steht, die für diese Suche bestens geeignet ist.

Die experimentellen Ergebnisse unterhalb einer Photonenenergie von  $E_\gamma=78,45$  eV zeigen noch regelmäßige Strukturen. Zudem weisen die Winkelverteilungen der Elektronenemission bis hinauf zu  $N=13$ , d.h. weit über 78,45 eV hinaus, Verhaltensweisen auf, wie sie bereits von den niedrigen Zuständen mit  $N<5$  her bekannt sind. Diese Befunde sprechen tendenziell gegen eine Existenz von chaotischem Verhalten in diesem Bereich.

## Ausblick

Basierend auf den vorliegenden Daten können in Zukunft detaillierte Messungen geplant und durchgeführt werden. Dabei sollte versucht werden, feinere Strukturen in der Region zwischen 78,5 eV und der Doppelionisationsschwelle bei 79 eV aufzulösen. Für solche Messungen ist eine Photonenenergieauflösung von ca. 1:90000 notwendig. Diese Präzision ist heutzutage an modernen Synchrotronanlagen bereits verfügbar.

Eine denkbare Erweiterung der Meßmethode besteht in der Verwendung von zusätzlichen Detektoren, die sensitiv für Photonen sind. Damit könnten eventuell die Lebenszeiten von angeregten Zuständen ermittelt werden, die strahlend zerfallen, oder es könnten Korrelationen zwischen den Emissionsrichtungen der Photonen und der Elektronen untersucht werden. Als erster Schritt in diese Richtung könnten die Multichannelplates des Elektronendetektors mit einer photosensitiven Schicht bedampft werden. Da die emittierten Photonen und Elektronen einige Nanosekunden getrennt auf dem Detektor einträfen, könnten sie aufgrund der Multihitfähigkeit dieser Detektoren separat nachgewiesen werden.

In einer aktuellen Veröffentlichung [76] werden die Korrelationen in einem Zweielektronensystem mit Hilfe von Laserpulsen untersucht. Durch Laserpulse werden hierbei beide Elektronen nacheinander auf definierte Zustände gehoben. Nach Autoionisation dieses doppelt angeregten Zustandes wird festgestellt, in welchem Zustand sich das  $He^+(N)$ -Ion befindet. Nun wird die Zeitdifferenz  $\tau$  zwischen den Laserpulsen variiert und die Ionisationsrate in die verschiedenen Endzustände  $N$  des  $He^+$ -Ions in Abhängigkeit von  $\tau$  gemessen. Ein Ergebnis dieser Messung ist unter anderem der Befund, daß doppelt hoch angeregte Zustände offensichtlich nicht durch einen langsamen Energieaustausch zwischen den beiden Elektronen zerfallen, sondern aufgrund einer einzigen harten Kollision miteinander. Diese Technik unterscheidet sich grundlegend von der in dieser Arbeit vorgestellten Meßmethode. Beispielsweise können keine Winkelverteilungen gemessen werden. Eine Kombination beider Techniken würde dies ermöglichen.

# Anhang A

## Simulation des Spektrometers

Während der Konzeption des Spektrometers war es sehr hilfreich, das Spektrometer mit Hilfe eines Computerprogramms zu simulieren. Da das Spektrometer nicht vorab unter realistischen Bedingungen getestet werden konnte, war eine detaillierte Simulation notwendig, um die zugrundeliegenden Konzepte zu überprüfen.

Das im folgenden beschriebene Verfahren wird Monte-Carlo-Simulation genannt. Der Name beruht darauf, daß eine Vielzahl von Teilchenflugbahnen berechnet werden, wobei die Startparameter innerhalb definierter Grenzen statistisch verteilt werden.

Dieser Abschnitt ist eine Ergänzung zu dem Kapitel, worin das Meßprinzip und das Spektrometer detailliert beschrieben werden.

Die Simulation ist in C++ programmiert und greift zur Visualisierung der Ergebnisse auf Funktionsbibliotheken von ROOT<sup>1</sup> zurück.

Mit Hilfe der Simulation konnten u.a. die folgenden Punkte untersucht werden:

- 1) Energie- und Winkelauflösung:** Die Energie der Elektronen muß mit ausreichender Genauigkeit bestimmt werden, so daß die verschiedenen Endzustände des  $He^+$ -Ions eindeutig getrennt werden können. Faktoren wie beispielsweise die Orts- und Zeitauflösung der Detektoren, die Eigenschaften des Gasjets und des Photonenstrahls müssen berücksichtigt werden.
- 2) Sekundärelektronen:** Schnelle Elektronen, die beispielsweise bei der Reaktion  $\gamma + He \rightarrow e^- + He_{(N=1)}^+$  frei werden, können an den Oberflächen des Spektrometers Sekundärelektronen ausschlagen, die bei der Messung und in den späteren Ergebnissen einen Untergrund verursachen.
- 3) Statistischer Untergrund:** Es muß überprüft werden, ob dieser Untergrund durch geeignete Auswahlregeln im Analyseprogramm herausgefiltert werden kann.
- 4) Rekonstruktion des Ursprungsortes:** Die Meßgenauigkeit des Systems kann erhöht

---

<sup>1</sup>ROOT ist ein am C.E.R.N. entwickeltes Programmpaket, das zur Datenanalyse- und Visualisierung von Experimenten in der Kernphysik entwickelt wurde.



werden, indem der Entstehungsort des  $e^-/He^+$ -Ion-Paares innerhalb des Reaktionsvolumens anhand der Meßdaten individuell für jede einzelne Reaktion rekonstruiert wird. Aufgrund der Impulserhaltung zwischen dem Elektron und dem  $He^+$ -Ion können aus den gemessenen Orten und Flugzeiten nicht nur die drei Impulskomponenten, sondern auch der Entstehungsort innerhalb der Reaktionszone ermittelt werden. Mit Hilfe dieser Information können die Impulse mit einer höheren Genauigkeit ermittelt werden.

### Modellierung der Anfangsparameter

Für die Eingangsparameter der Simulation wurden die folgenden Werte gewählt. Grundsätzlich wurden die Fehlergrößen aus Vorsicht heraus eher zu pessimistisch gewählt, d.h. in die Richtung, die zu einer größeren Meßungenauigkeit des Systems führt. In den Werten für die Orts - bzw. Zeitauflösungen der Detektoren sind bereits die auflösungsverschlechternden Eigenschaften der Spektrometerabschlußgitter und der signalverarbeitenden Elektronik mit inbegriffen.

Parameter der Simulation	
Flugstrecke der Elektronen	3,3 cm
Flugstrecke der $He^+$ -Ionen	26,35 cm
Ortsauflösung des $e^-$ -Detektors	$\Delta R_{e^-} = 0,4$ mm (FWHM)
Ortsauflösung des $He^+$ -Detektors	$\Delta R_{He^+} = 1$ mm (FWHM)
Zeitauflösung des $e^-$ -Detektors	$\Delta t_{e^-} = 1,5$ ns (FWHM)
Zeitauflösung des $He^+$ -Detektors	$\Delta t_{He^+} = 4$ ns (FWHM)
Elektrische Feldstärke	1,94 V/cm
Breite des Photonenstrahls im Fokus (hor.)	$\Delta F_{hor} = 0,5$ mm (FWHM)
Breite des Photonenstrahls im Fokus (vert.)	$\Delta F_{ver} = 0,3$ mm (FWHM)
Temperatur der Gasdüse	25 °C
Speedratio des Gasjets	S=40
Entfernung zwischen Düse und Skimmer	10 mm
Durchmesser des Skimmereingangs	$\varnothing=0,3$ mm
Maschenweite der Spektrometerabschlußgitter	0,2 mm
Durchmesser der effektiven Detektorfläche	$D_{MCP} = 76$ mm
Photonenenergie	78 eV bis 79 eV
Distanz zwischen Skimmer und Targetzone	8 cm.

Reaktionen können dort stattfinden, wo sich Photonenstrahl und Gasjet kreuzen. Die Größe des Reaktionsvolumens wird daher in den zwei Raumrichtungen orthogonal zum Lichtstrahl nur von der Größe des Lichtfokus bestimmt. Entlang des Lichtstrahls ist die Reaktionszone so breit wie der Gasjet an dieser Stelle. Die Breite folgt daher geometrisch aus den Abständen zwischen Düse und Skimmer, Düse und Reaktionszone

und dem Skimmerdurchmesser. Ein größerer Abstand zwischen Düse und Skimmer führt demnach zu einem schmaleren Gasjet und einer geringeren Targetdichte.

In die oben angegebenen Werte für die Flugzeitauflösung gehen mehrere Faktoren ein: Die Detektoren weisen eine Zeitauflösung von ca. 500 ps auf. Hinzu kommt die Meßgenauigkeit des verwendeten Time-to-Digital-Konverters mit ca. 500 ps. Da für die Flugzeitbestimmung die Differenz zwischen Detektorsignal und Synchrotron-Bunchmarker verwendet wird, geht dieser Fehler sogar zweifach ein. Auf der  $He^+$ -Seite muß beachtet werden, daß die Flugzeit des  $He^+$ -Ions beim Durchgang durch das Abschlußgitter um einige Nanosekunden verfälscht wird. Dieser Effekt ist für Elektronen vernachlässigbar. Des weiteren muß berücksichtigt werden, daß Defokussierungseffekte beim Durchgang durch die Gittermaschen auch die Ortsauflösung beeinflussen.

Zusätzlich zu diesen Werten muß die relative Intensität der Reaktionskanäle berücksichtigt werden, um die Verhältnisse zwischen der Untergrundrate und den echten Reaktionen abschätzen zu können. Für die Simulation wurde angenommen, daß die Reaktionswahrscheinlichkeit d.h. der partielle Wirkungsquerschnitt eines Reaktionskanals annähernd mit  $\sigma(N) \sim N^{-3}$  skaliert (siehe Bild A.1).

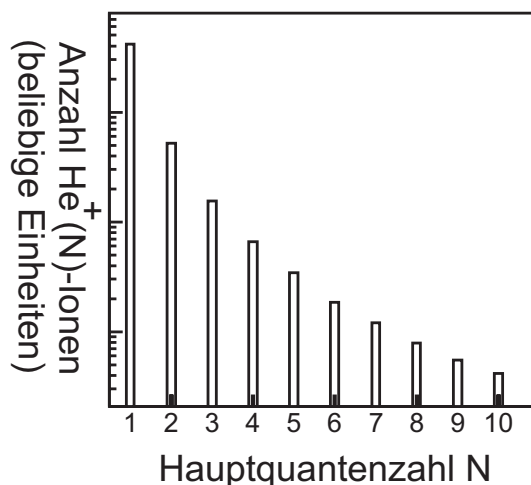


Abbildung A.1: Relative Häufigkeitsverteilung der Endzustände für  $He_{(N)}^+$  (Logarithmisch dargestellt).

### Ablauf der Simulation

Die folgenden Schritte beschreiben den Verlauf der Simulation für eine einzelne Reaktion. Während der Simulation werden ca.  $20 \cdot 10^6$  Ereignisse simuliert.

#### Schritt 1: Startwerte generieren

Für jede einzelne Reaktion werden Startwerte gemäß den oben beschriebenen Parametern zufällig erzeugt. Dazu gehört der Reaktionsort innerhalb des Reaktionsvolumens,

der Endzustand  $N$  des  $He^+$ -Ions, worüber die frei werdende kinetische Energie des Elektrons und  $He^+$ -Ions festgelegt sind und die Emissionsrichtung des Elektrons. Das  $He^+$ -Ion erhält aufgrund der Impulserhaltung den entgegengesetzten Impuls. Für die Winkelverteilung der Elektronen wurde eine sphärisch symmetrische Form gewählt. Für niedrige  $N$  ( $N=1,2,3$ ) gilt zwar eher eine Verteilung, die zwischen einer Kugel und einer reinen Dipolverteilung [56] liegt. Für hohe  $N$  ( $N > 7$ ) ist dagegen eine torusförmige Verteilung zu erwarten [61]. Es hat sich jedoch herausgestellt, daß sich die Ergebnisse der Simulation dadurch nicht grundlegend ändern. Zusätzlich zu den Anfangsimpulsen aus der Reaktion muß noch die Geschwindigkeit des Gasjets und seine innere Impulsverteilung berücksichtigt werden, da sich so feststellen läßt, ob der Jet eventuell vorgekühlt werden muß. Die Geschwindigkeitskomponenten folgen direkt aus der angenommenen Düsentemperatur, der geometrischen Form des Gasjets und dem Speedratio, das die interne Impulsverteilung des Gasjets charakterisiert (S. 37).

### **Schritt 2:** Flugbahnen berechnen

Mit einfachen Gleichungen der klassischen Mechanik wird die Bahn des Elektrons und des  $He^+$ -Ions berechnet. Trifft das Elektron dabei auf die Innenoberfläche des Spektrometers, so werden von dieser Stelle aus neue Elektronen gestartet, deren Richtungsverteilung isotrop ist. Die kinetischen Energien dieser Sekundärelektronen werden statistisch verteilt zwischen 1 eV und der Energie des primären Elektrons. Es werden so lange neue Flugbahnen berechnet, bis eines der Sekundärelektronen auf dem Elektronendetektor auftritt. Anschließend wird die Information, ob das auf dem Detektor aufgetroffene Elektron ein „echtes“ oder ein Sekundärelektron war, gelöscht. Es muß betont werden, daß die hier beschriebene Modellierung der Sekundärelektronen völlig willkürlich ist.

### **Schritt 3:** Meßfehler berücksichtigen und evtl. Sekundärelektronen erzeugen

Auf die in Schritt 2 berechneten Endpositionen des Elektrons und des  $He^+$ -Ions werden gemäß den Detektorauflösungen Meßfehler dazugerechnet. Gleiches gilt für die Flugzeiten.

### **Schritt 4:** Impulse berechnen

Anhand der Flugzeit des Elektrons und seinem Ort auf dem Detektor wird der Impuls  $\vec{P}_e$  des Elektrons berechnet. Mit Hilfe dieser Information kann aus den Daten des  $He^+$ -Detektors der Ursprungsort der beiden Teilchen innerhalb des Reaktionsvolumens angenähert werden. Nun wird der Impuls des Elektrons erneut berechnet. Die Energieauflösung wird dadurch um ca. 30% gesteigert.

### **Schritt 5:** Untergrund herausfiltern

In weit über 99% der Reaktionen wird ein  $He^+$ -Ion im Grundzustand und ein dement-

sprechend schnelles Elektron erzeugt. Diese schnellen Elektronen treffen auf die Oberflächen des Spektrometers und lösen dort Sekundärelektronen aus, die wiederum auf dem Elektronendetektor auftreffen können. Ihre Ankunftszeiten und Orte sind statistisch verteilt. Das würde in der Messung zu einem erheblichen Untergrund führen. Die dazugehörigen  $He^+$ -Ionen sind ebenfalls sehr schnell und können daher von den niederenergetischen Reaktionen räumlich und zeitlich gut getrennt werden. Falls beide Teilchen aus der gleichen Reaktion stammen, muß die Summe ihrer Impulse innerhalb der Meßgenauigkeit bei 0 liegen. Mit Hilfe dieser Bedingungen kann der Untergrund aus den gemessenen Daten sehr effizient herausgefiltert werden (Abb. A.3).

### Ergebnisse der Simulation

Die oben beschriebenen Parameter führen zu den folgenden Ergebnissen: Die Oberfläche des Elektronendetektors wird mit den Ereignissen, die nachgewiesen werden sollen ( $N > 4$ ), gut ausgeleuchtet (Bild A.2 a). Die mittlere Flugzeit der Elektronen liegt bei ca. 44 ns (Bild A.2 b) - bei einer Flugzeitauflösung von ca. 1 ns ist das ein guter Wert.

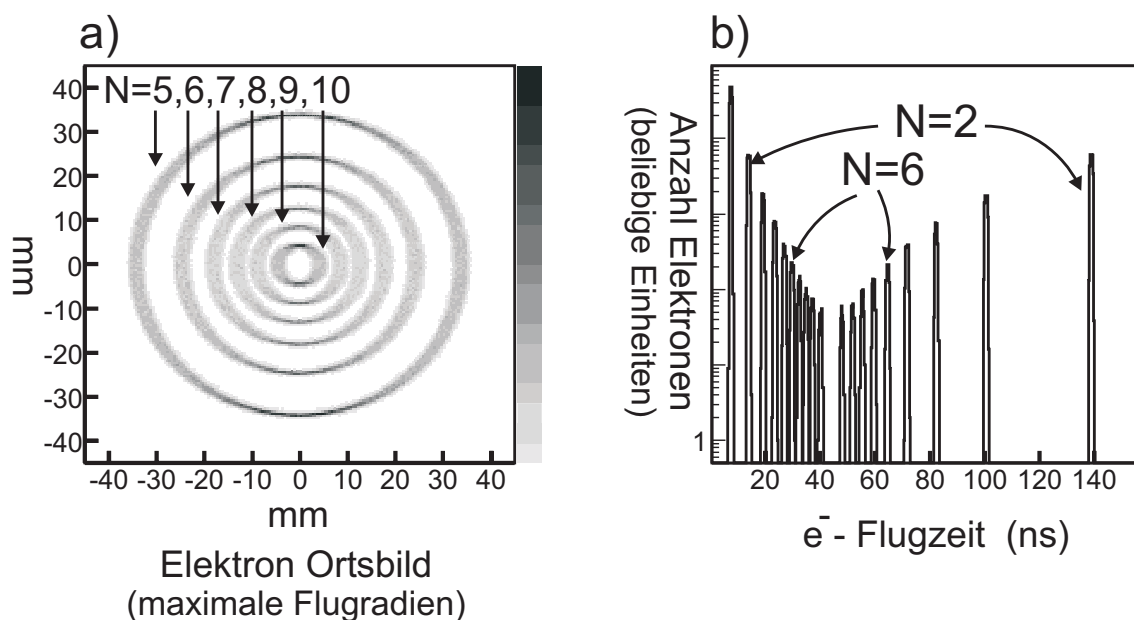


Abbildung A.2: a) Maximal mögliche Flugradien der Elektronen, b) Längste und kürzeste Flugzeiten der Elektronen

Die erzielte Energieauflösung ist ausreichend, um die verschiedenen Reaktionskanäle voneinander zu trennen (Bild A.3 b). Der durch Sekundärelektronen verursachte Untergrund im Energiespektrum ist sehr groß (Bild A.3 a). Er kann jedoch sehr effektiv herausgefiltert werden, indem geeignete Bedingungen auf Ort und Flugzeit des  $He^+$ -Ions angewendet werden. Die Notwendigkeit des koinzidenten Nachweises der Elektronen zusammen mit den entsprechenden  $He^+$ -Ionen wird hier deutlich sichtbar. Die  $He^+$ -Ionen benötigen ca.  $10,6 \mu s$  um den  $He^+$ -Detektor zu erreichen. Zusätzlich zu

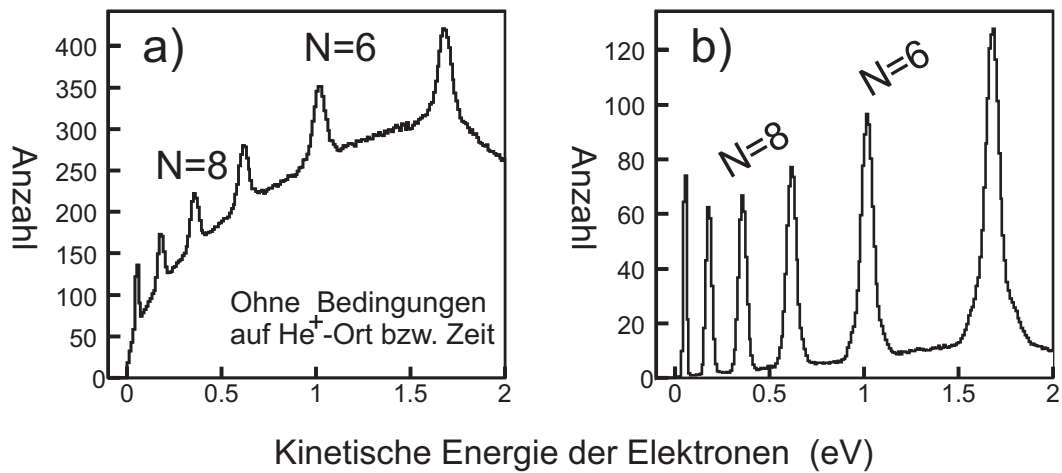


Abbildung A.3: **a)** kinetische Energie der Elektronen, **b)** Das gleiche Spektrum unter Anwendung der Filterbedingungen (Vergl. hierzu Abb. 5.14 auf Seite 70).

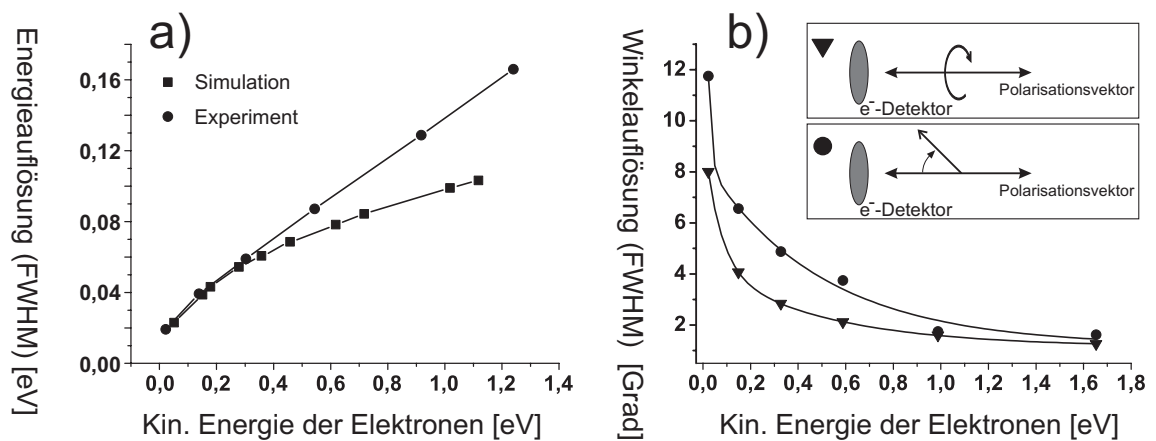


Abbildung A.4: **a)** Die Energie- bzw. **b)** Winkelauflösung in Abhängigkeit von der Elektronenenergie. Die jeweiligen Winkelaufösungen sind nicht konstant, sondern wiederum abhängig von der Emissionsrichtung. Die hier eingetragenen Werte sind daher lediglich Mittelwerte.

der relativ geringen Geschwindigkeit, die sie aufgrund der Ionisation erhalten, besitzen sie noch die Geschwindigkeitskomponente des Gasjets (ca. 1760 m/s), so daß sie nicht in der Mitte des Detektors auftreffen, sondern ca. 18,6 mm versetzt. Bild A.5 a zeigt, daß selbst die schnellsten  $He^+$ -Ionen noch auf dem Detektor (ca. 38 mm Radius) auftreffen. In Abbildung A.5 b sind nur  $He^+$ -Ionen mit  $N > 4$  dargestellt. Die Ortsauflösung reicht demnach aus, um sie von den höherenergetischen Ereignissen zu trennen.

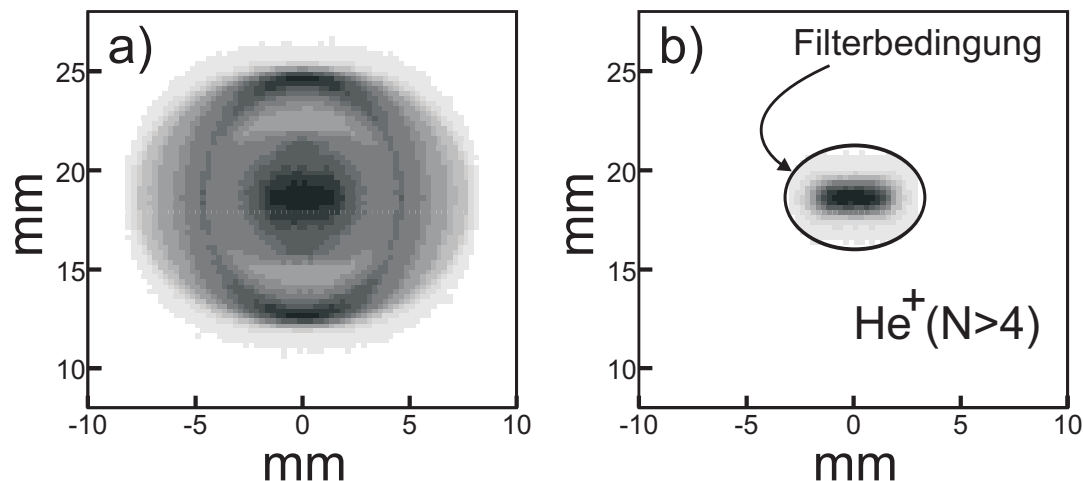


Abbildung A.5: **a)** Ortsbild aller  $He^+$ -Ionen, **b)** Ortsbild von  $He^+_{(N)}$ -Ionen mit  $N > 4$ . Zusätzlich ist die Filterbedingung eingezeichnet.

Mit Hilfe der Simulation können verschiedene Fehlereinflüsse untersucht werden. Im folgenden wird dies anhand der Energieauflösung beim Peak für  $N=7$  (Bild A.3 b) diskutiert - d.h. bei einer kinetischen Energie von ca. 0,6 eV. Die Breite bei halber Höhe (FWHM) beträgt in diesem Fall ca. 0,077 eV. Ohne Rekonstruktion des Ursprungsortes und anschließender Neuberechnung des Elektronimpulses beträgt diese Breite 0,1 eV.

Die Simulation hat gezeigt, daß die Temperatur des Gasjets, d.h. seine interne Impulsverteilung, kaum Einfluß auf die Energieauflösung des Systems hat. Die Auflösung verbessert sich für den Grenzfall einer Jettemperatur von 0 Kelvin nur auf 0,069 eV (von 0,077 eV).

Die Energieauflösung ist abhängig von der Flugzeit der Elektronen. Für Elektronen, die beispielsweise zunächst vom Detektor wegfliegen, ist die Energieauflösung weitaus besser als für Elektronen, die direkt auf den Detektor zufliegen. Im hier besprochenen Beispiel eines Elektrons mit einer kinetischen Energie von 0,6 eV führen die unterschiedlichen Flugzeiten von 30 ns bzw. 60 ns zu einer Energieauflösung von 0,167 eV bzw. 0,09 eV. In den Fällen, in denen sich das Elektron zunächst parallel zur Detektoroberfläche bewegt, ergibt sich ein Fehler von 0,07 eV<sup>2</sup>.

Basierend auf den Ergebnissen der Simulation wurde das Spektrometer konstruiert und erfolgreich eingesetzt.

<sup>2</sup>Der Fehler fällt in diesem Fall geringer aus, weil der Beitrag des Meßfehlers aus den beiden anderen Raumrichtungen niedriger ist.

## Anhang B

# Erzeugung von Synchrotronstrahlung

Beschleunigte elektrische Ladungen erzeugen elektromagnetische Strahlung. Beim Betrieb von Teilchenringbeschleunigern treten dadurch unerwünschte Energieverluste auf, da die Bahnen der Teilchen mehrmals pro Umlauf durch Ablenkmagneten korrigiert werden müssen, um auf eine Kreisbahn gezwungen zu werden. Dieser störende Abstrahleffekt wurde in den 40er Jahren beim Betrieb von Synchrotronbeschleunigern entdeckt und wird daher Synchrotronstrahlung genannt. Was zunächst als Störeffekt angesehen wurde, stellte sich bald als sehr hilfreiches Mittel heraus, um Strahlung hoher Intensität in einem weit ausgedehnten Frequenzbereich zu erzeugen. Dadurch wurden der Experimentalphysik neue Gebiete eröffnet.

Die Anwendungsmöglichkeiten von Synchrotronstrahlung sind sehr vielfältig, da mit ihrer Hilfe ein sehr großer Bereich des Spektrums angefangen bei Infrarotstrahlung bis hin zur Gammastrahlung abgedeckt werden kann. Synchrotronstrahlung ist für weite Teile der Atomphysik, der Oberflächenphysik, der Biochemie und der Festkörperphysik ein wichtiges Untersuchungswerkzeug geworden.

Aus diesem Grund wurden Ringbeschleuniger konstruiert, die speziell für die Erzeugung von Synchrotronstrahlung konzipiert waren. Die ersten Anlagen dieser Art hatten noch einen geringen Umfang<sup>1</sup>. Moderne Synchrotronanlagen<sup>2</sup> besitzen Ringdurchmesser von über 75 m.

In diesen Anlagen werden Elektronenpakete<sup>3</sup> nahe an die Lichtgeschwindigkeit beschleunigt.<sup>4</sup> In den Ring werden nacheinander mehrere dieser Elektronenpakete injiziert. Die Anordnung der Pakete wird Füllmuster genannt. Die Befüllung des Rings kann nicht direkt erfolgen. Die Elektronen müssen zuvor auf eine bestimmte Mindestgeschwindigkeit beschleunigt werden, bevor sie in den Hauptring injiziert werden (Abbildung B.1). Typische Ringströme liegen zwischen 100 mA und 200 mA.

---

<sup>1</sup>Die Synchrotronquelle von Madden und Codling [9] beispielsweise besaß einen Durchmesser von ca. 1,7 m.

<sup>2</sup>Beispiele hierfür sind die ALS in Berkeley, USA, oder die deutschen Synchrotronanlagen HASYLAB in Hamburg und BESSYII in Berlin.

<sup>3</sup>*engl.* Bunche. Ein Bunch enthält einige  $10^{10}$  Elektronen.

<sup>4</sup>Eine Ausnahme ist HASYLAB in Hamburg. Hier werden Positronen beschleunigt. Die Vorteile von Positronen bei dieser Anwendung werden weiter unten beschrieben.

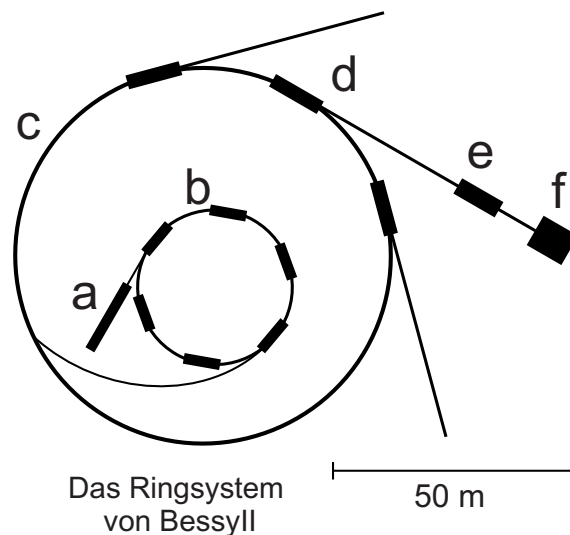


Abbildung B.1: Der Aufbau des Ringsystems am BESSYII: Im Mikrotron (a) werden Elektronen mit einer Energie von ca. 50 MeV erzeugt. Anschließend werden sie in den kleinen Synchrotronring (b) überführt. Hier erst werden sie auf eine kinetische Energie von ca. 1,7 GeV beschleunigt. Danach werden sie in den Speicherring (c) injiziert, wo nur noch eine regelmäßige Nachbeschleunigung erfolgt, um Energieverluste auszugleichen. Am Undulator (d) wird besonders intensive Synchrotronstrahlung erzeugt und durch das Strahlrohr und den Monochromator (e) zum Meßplatz (f) geleitet.

Das Vakuum innerhalb des Ringsystems muß extrem rein sein, um Verluste durch Stöße mit dem Restgas zu minimieren. Solche Verluste können jedoch nie zur Gänze vermieden werden. Dadurch verringert sich mit der Zeit die Anzahl der Elektronen. Die Lebenszeit einer Ringfüllung wird dadurch auf einige Stunden begrenzt. Nach dieser Zeit muß der Ring neu befüllt werden. Durch Stöße mit dem Restgas werden positive Ionen erzeugt, die durch die negative Ladung des Elektronenstroms angezogen werden und wiederum mit Elektronen kollidieren können. Aus diesem Grund wird der Ring am HASYLAB mit Positronen anstelle von Elektronen befüllt. Die nun positive Raumladung des Ringstroms treibt die positiven Ionen des Restgases vom Strahl weg. Das Ringvakuum kann daher in diesem Fall bei gleichen Lebenszeiten etwas schlechter sein. Ein weiterer Effekt, der die Lebenszeit verkürzt, ist die Abstoßung der Elektronen bzw. der Positronen untereinander. Aus diesem Grund ist die Lebenszeit im Single- bzw. Double-Bunch-Modus etwas geringer, da in diesen Fällen die Pakete mehr Elektronen enthalten als im kontinuierlichen Modus, um trotz der wenigen Pakete möglichst hohe Photonenflüsse zu erreichen.

Das evakuierte Rohr, in dem der Elektronenstrahl umläuft, mißt nur wenige cm im Durchmesser. Der Durchmesser des eigentlichen Elektronenstrahls beträgt ca. 1 mm oder weniger.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Der Strahl am HASYLAB besitzt eine Ausdehnung von ca. 1,2 mm hor.  $\times$  0,13 mm vert. (FWHM). Der Strahl an der neueren Anlage BESSYII ist sehr viel schmaler. Die Intensität und die Qualität der optischen Weiterverarbeitung der Strahlung wird dadurch bedeutend erhöht.



Der Ring setzt sich aus vielen verschiedenen Bauteilen zusammen. Regelmäßig angeordnete Ablenkmagnete zwingen die Elektronenpakete auf die Kreisbahn. Hier entsteht Synchrotronstrahlung. Diese Strahlung hat jedoch nicht die Intensität, die für einige Experimente notwendig ist. In sogenannten Undulatoren kann für diese Zwecke besonders intensive Synchrotronstrahlung erzeugt werden. Das Funktionsprinzip der Undulatoren wird weiter unten beschrieben. Weitere Elemente des Rings sind die Nachbeschleunigungsresonatoren, in denen den Elektronenpaketen die Energie wieder zugeführt wird, die sie durch das Aussenden von Synchrotronstrahlung verloren haben. Dazu kommen noch Geräte, mit denen die Lage des Strahls innerhalb des Rings überprüft und automatisch korrigiert werden kann.

Synchrotronstrahlung wird üblicherweise in zwei verschiedenen Betriebsmodi erzeugt. Es gibt den kontinuierlichen Strahlbetrieb, bei dem sich sehr viele Elektronenpakete im Ring befinden. Dadurch werden hohe Photonenflüsse erreicht. Im Gegensatz dazu gibt es den Single-Bunch- bzw. Double-Bunch-Betrieb, in dem nur ein oder zwei Pakete im Ring umlaufen. In diesem Betriebsmodus wird nicht kontinuierliche Strahlung erzeugt, sondern kurze Lichtpulse, die bei jedem Durchqueren der Elektronenpakete durch die Ablenkmagneten oder Undulatoren entstehen. Dieser Strahlbetrieb ist für Messungen wichtig, bei denen der exakte Zeitpunkt des Lichtpulses bekannt sein muß - beispielsweise für Flugzeitmessungen wie im vorliegenden Fall.

Der gepulste Strahlmodus birgt gegenüber dem kontinuierlichen Betrieb den Nachteil, daß der Photonenfluß um ca. 80% geringer ausfällt. Die zeitliche Länge der Lichtpulse wird durch die Ausdehnung der Elektronenpakete entlang ihrer Flugbahn bestimmt. Am BESSYII ist sie kürzer als 50 ps.

## **Funktionsprinzip von Undulatoren und Wigglern**

Die Strahlung, die beim Durchgang durch einen Ablenkmagneten erzeugt wird, ist nicht sehr intensiv und nicht ausreichend gerichtet, da sie entlang der gesamten Krümmungsbahn abgestrahlt wird. Eine weitaus höhere Intensität und eine gerichtete Abstrahlung wird erreicht, wenn viele kleinere Magnete (ca. 80 bis 100) auf einem geraden Teilstück des Rings in einer Reihe angeordnet werden (siehe Abb. B.2). Solche Anordnungen heißen Wiggler und Undulatoren. Das jeweilige Funktionsprinzip ist nahezu identisch - die spektralen Eigenschaften und Intensitäten der erzeugten Strahlung sind jedoch sehr unterschiedlich.

Innerhalb eines Wigglers bzw. Undulators werden die Elektronenpakete von den Magnetfeldern auf schlangenförmige Bahnen gezwungen. Im Bezugssystem der Elektronen führt das zu einer dipolförmigen Abstrahlung von Energie. Da sich die Elektronen aber nahezu mit Lichtgeschwindigkeit bewegen, nimmt die Abstrahlcharakteristik im Laborsystem eine stark asymmetrische, entlang des Elektronenstrahls nach vorne gerichtete Form an (Abb. B.3).

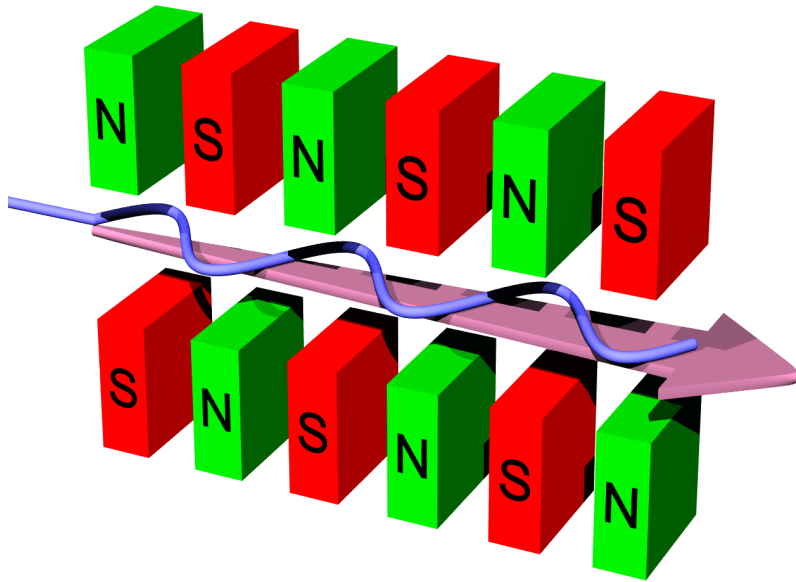


Abbildung B.2: Durch eine Reihe von Permanentmagneten wird das Elektronenpaket auf eine schlangenähnliche Bahn gezwungen. Die dabei entstehende Synchrotronstrahlung (Pfeil) wird aufgrund von relativistischen Effekten in Flugrichtung der Elektronen gebündelt abgestrahlt. Im Aufbau ähneln sich Wiggler und Undulatoren sehr. Die Eigenschaften der erzeugten Strahlung sind jedoch grundlegend verschieden (siehe Text).

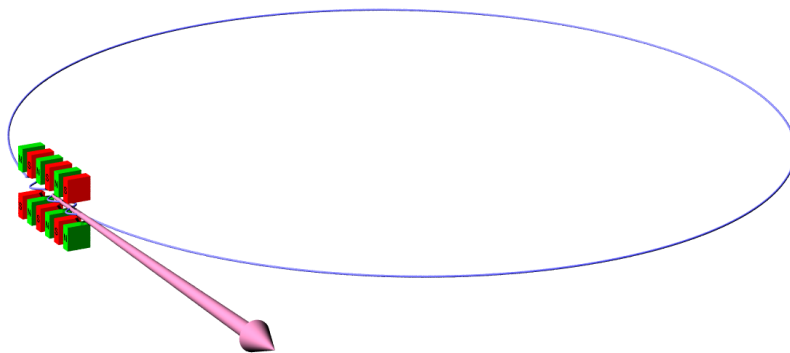


Abbildung B.3: Im Bezugssystem der Elektronen entspricht die Form der Abstrahlung einem Hertzschen Dipol. Durch die Transformation ins Laborsystem wird daraus eine stark asymmetrische, nach vorne gerichtete Verteilung.

Die Anzahl der Photonen  $A(E_\gamma)$  mit einer bestimmten Energie  $E_\gamma$ , die beim Durchgang eines Elektronenpaketes durch einen Wiggler produziert wird, ist direkt proportional zur Anzahl  $N$  der Magnetpaare, d.h.

$$A(E_\gamma) \sim N \quad (\text{B.1})$$

Beim Undulator hingegen gilt  $A(E_\gamma) \sim N^2$ . Der Unterschied liegt in der Art und Weise, wie die erzeugten Wellen überlagert werden. Bei Wiggeln erfolgt die Überlagerung inkohärent - bei Undulatoren dagegen bei einer jeweils einstellbaren Wellenlänge kohärent.

In Undulatoren sind die Magnetfelder schwächer und die horizontalen Abstände zwischen den Magneten kleiner. Durch die schwächeren Magnetfelder werden die Elektronen während der Schwingungen nicht so weit aus ihrer mittleren Bewegungsrichtung herausgelenkt. Dadurch erfolgt die Abstrahlung gerichteter und die nun nahezu parallel verlaufenden Wellen können sich kohärent überlagern.<sup>6</sup>

Das Energiespektrum eines Wigglers hat eine breite Form und ist über einen sehr großen Energiebereich ausgedehnt, d.h. es werden gleichzeitig Photonen mit sehr unterschiedlichen Energien erzeugt. Beim Undulator ist die Bedingung konstruktiver Interferenz nur für einen bestimmten schmalbandigen Wellenlängenbereich erfüllt. Beispiele solcher Verteilungen sind in Abbildung B.4 dargestellt. Undulatoren produzieren nur innerhalb sehr schmaler Energiebereiche Photonen. Die Breite dieser Verteilungen ist proportional zu  $N^{-1}$ . Zusammen mit Gleichung B.1 resultiert daraus das quadratische Anwachsen der Intensität mit steigenden  $N$ .

Um Photonen mit unterschiedlichen Energien erzeugen zu können, muß die Stärke der Magnetfelder innerhalb der Undulatoren variabel sein<sup>7</sup>. Eine Änderung der Magnetfeldstärke wird durch ein Vergrößern bzw. Verkleinern des vertikalen Abstandes, dem sogenannten Gap, zwischen den Magnetreihen erreicht. Bei Feldstärken von über einem Tesla muß die Mechanik der Undulatoren enormen Kräften standhalten können, damit nicht Verformungen entstehen, die die Qualität der Felder verschlechtern. Wiggler arbeiten dagegen statisch, da sie ja von vornherein in einem sehr breiten Energiebereich Photonen produzieren.

## Der Monochromator

Der Frequenzbereich der Strahlung, die von einem Undulator erzeugt wird, ist zwar sehr viel schmaler als dies bei Wiggeln der Fall ist. Üblicherweise ist jedoch die Energieschärfe von Undulatoren trotzdem für viele Anwendungen noch zu grob. Aus diesem Grund befindet sich im Strahlengang zwischen Undulator und Meßstation ein Monochromator, der aus der breiten Energieverteilung des erzeugten Lichts ein schmales

---

<sup>6</sup>Quantitativ wird das mit dem Parameter  $K$  ausgedrückt. Für Undulatoren ist  $K < 1$  und für Wiggler  $K \gg 1$ . Es gelten die Beziehungen  $K \sim B\lambda_0$ , wobei  $B$  die Stärke des Magnetfelds und  $\lambda_0/2$  der horizontale Abstand zwischen den Magneten ist, bzw.  $K \sim \delta/\theta$ , wobei  $\delta$  die maximale Winkelauslenkung der Elektronen und  $\theta$  der Öffnungswinkel des Abstrahlkegels ist.

<sup>7</sup>Die Stärke des Magnetfeldes bestimmt die transversale Beschleunigung der Elektronen und damit die Wellenlänge, bei der die Resonanzbedingung der kohärenten Überlagerung erfüllt ist.

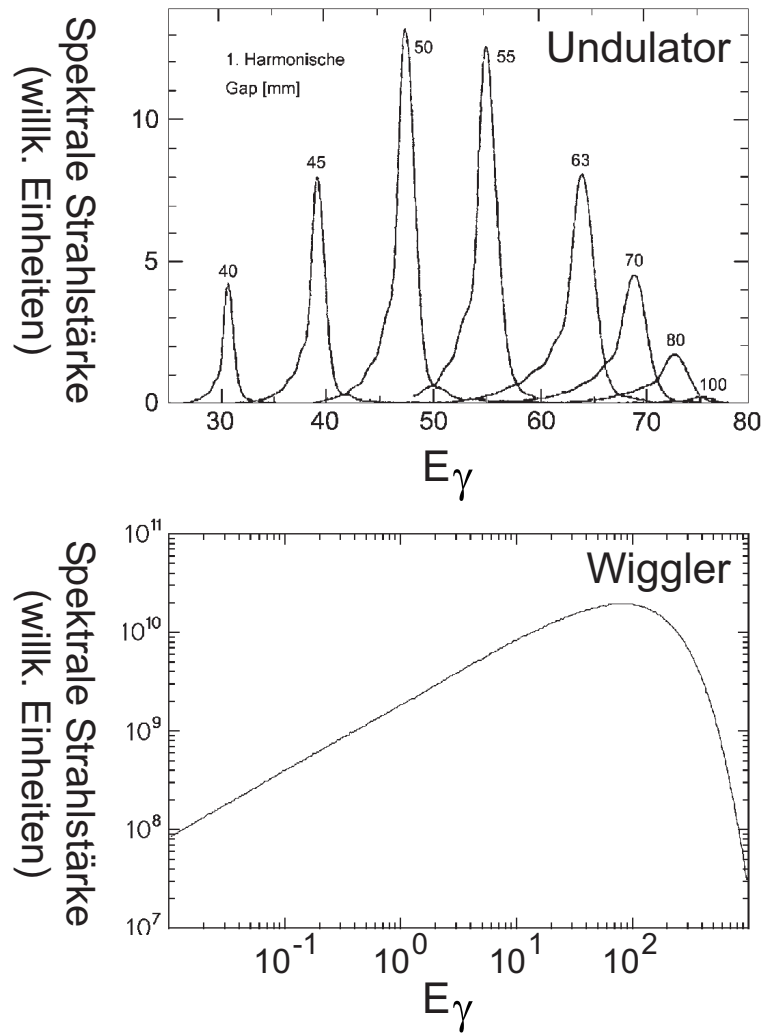


Abbildung B.4: Beispiele [67] der verschiedenen Spektren eines Wignlers und eines Undulators. Beim Undulator kann die Position der schmalen Verteilung durch ein Verändern des vertikalen Abstandes zwischen den Magnetreihen (dem Gap) beeinflusst werden. Beim Undulator ist die Breite dieser Verteilung proportional zu  $N^{-1}$ .

Energieband herauspräparieren kann. Das Funktionsprinzip von Monochromatoren basiert auf der reflektierenden Beugung an Gittern bzw. an Kristallen. Durch konstruktive bzw. destruktive Überlagerung der reflektierten Wellen bilden sich bei verschiedenen Reflektionswinkeln  $\alpha_n$  scharfe Intensitätsmaxima heraus. Bei gegebener Wellenlänge  $\lambda$ , Einfallswinkel  $\beta$  und Gitterkonstante  $d$  gilt für die Maxima die Beziehung<sup>8</sup>

$$\sin(\alpha_n) + \sin(\beta) = \frac{n\lambda}{d} \quad (\text{B.2})$$

Aus dem aufgefächerten Frequenzspektrum kann nun mit einer schmalen Spaltblende der gewünschte Frequenzbereich ausgewählt werden. Die Breite des Spalts bestimmt die Frequenzbandbreite der durchgelassenen Strahlung.

Bei Experimenten, die auf eine hohe Energieauflösung angewiesen sind, muß der Spalt also möglichst schmal eingestellt werden. Dadurch wird allerdings der Photonenfluß drastisch reduziert. Es gibt eine Untergrenze, ab der eine Verkleinerung des Spalts keine weitere Verbesserung der Energieauflösung zur Folge hat. Die erreichbare Energieauflösung ist für jedes Strahlrohr unterschiedlich, da sie mit der Qualität der verwendeten optischen Elemente und der Größe des Quellpunktes innerhalb des Undulators zusammenhängt.

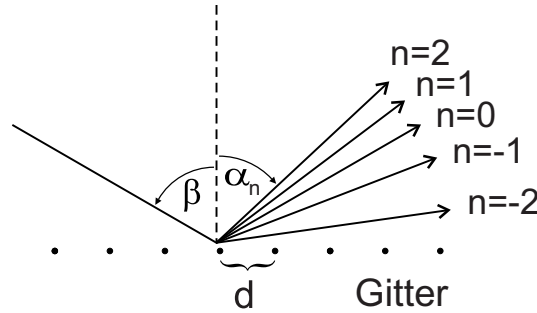


Abbildung B.5: Bei der Beugung am Gitter stehen die Abstrahlwinkel  $\alpha_n$  der Beugungsmaxima über die Gleichung  $\sin(\alpha_n) + \sin(\beta) = n\lambda/d$  mit dem Einfallswinkel  $\beta$  in Beziehung.

Die Einstellung des Monochromators und der Polschuhabstand, d.h. der Gap des Undulators, müssen aufeinander abgestimmt sein, um einen hohen Photonenfluß zum Experiment zu gewährleisten. Üblicherweise wird diese Aufgabe automatisch vom Meßplatzrechner übernommen, der den optimalen Wert des Gaps für eine bestimmte Photonenenergie berechnet. Im vorliegenden Fall war diese Berechnung jedoch fehlerhaft, so daß durch die automatische Einstellung nicht die maximal mögliche Lichtintensität erreicht wurde. Daher mußte die Steuerung von Monochromator und Undulator-Gap voneinander entkoppelt und manuell durchgeführt werden. Die optimale Einstellung des Gaps ist dann gefunden, wenn die hinter dem Ausgangsspalt des Monochromators gemessene Photonenrate maximal ist.

<sup>8</sup>Für die hier nicht weiter besprochenen Kristallmonochromatoren gilt die etwas anders lautende Bragg-Beziehung  $2d\cos(\alpha_n) = n\lambda$  mit  $\beta = \alpha_n$ . Die hinzugekommene Beziehung zwischen Einfalls- und Ausfallswinkel basiert auf zusätzlichen Interferenzeffekten zwischen Wellen, die an verschiedenen Kristallschichten gestreut werden. Diese Monochromatoren werden ab einer Photonenenergie von ca. 1 keV eingesetzt.

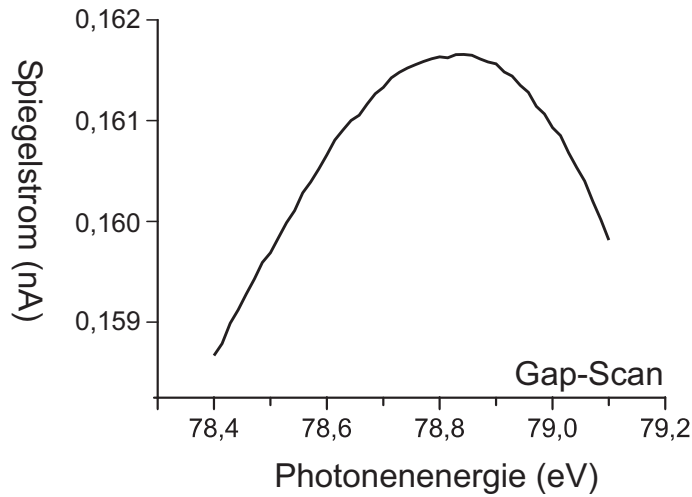


Abbildung B.6: Dargestellt ist die Rate der vom Undulator produzierten Photonen bei einer bestimmten Einstellung des Gaps, aufgetragen gegen die Photonenenergie. Um die Position des Maximums zu höheren Energien hin zu verschieben, muß der Gap, d.h. der vertikale Abstand zwischen den Undulator-Magneten, verringert werden.

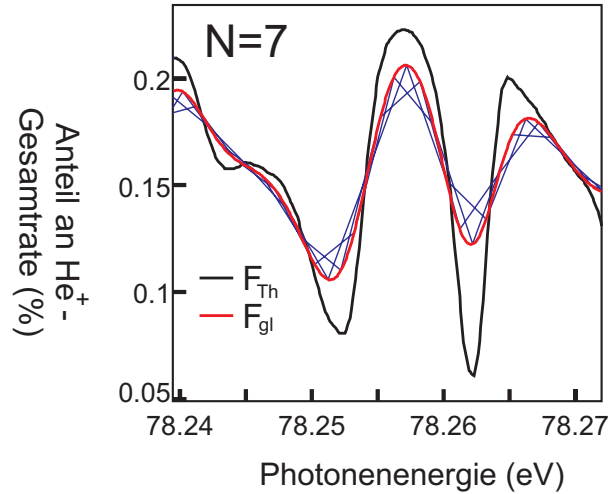


Abbildung B.7: Im ersten Schritt werden die theoretischen Daten (schwarze Kurve) mit einer Gaußverteilung der Breite 3,9 meV (FWHM) gefaltet (rot). Anschließend muß die Schrittweite von 3 meV während des Scans berücksichtigt werden. Zu diesem Zweck wird eine Vielzahl von Linienzügen gezeichnet (blau). Jeder dieser Linienzüge besitzt in äquidistanten Abständen von 3 meV Stützstellen, die auf der geglätteten Kurve (rot) liegen. In der Abbildung sind nur drei solcher Linienzüge eingezeichnet. Diese Linienzüge bedecken den Bereich, innerhalb dessen sich die experimentellen Daten befinden müssen, falls vollständige Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie besteht.

## Anhang C

### Faltung der theoretischen Daten

Um die theoretischen Daten mit den experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, müssen sie der verwendeten Photonenenergieauflösung entsprechend geglättet werden.

Im folgenden sei  $F_{Th}(x)$  die ungeglättete theoretische Kurve in Abhängigkeit von der Photonenenergie  $E$ . Die geglättete Kurve  $F_{gl}(E)$  ergibt sich durch Faltung von  $F_{Th}(E)$  mit einer Gaußverteilung.

$$F_{gl}(E) = \int_{z=-\infty}^{z=+\infty} F_{Th}(z) \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(z-E)^2}{2\sigma^2}\right) dz \quad (\text{C.1})$$

Anschließend muß die Schrittweite von 3 meV während des Scans berücksichtigt werden. Zu diesem Zweck wird eine Vielzahl von Linienzügen gezeichnet (siehe Abb. B.7). Jeder dieser Linienzüge besitzt in äquidistanten Abständen von 3 meV Stützstellen, die auf der geglätteten Kurve  $F_{gl}$  liegen. In der Abbildung sind nur drei Linienzüge eingezeichnet. Die Einhüllende dieser Linienzüge ist der Bereich, in dem der Linienzug der experimentellen Daten liegen sollte, falls eine absolute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment besteht. Diese Einhüllenden sind in den Abbildungen 7.6 und 7.9 (Seite 84 und 87) als blaue Bereiche dargestellt.

## Anhang D

### Wichtige Kennzahlen des Experiments

Das Spektrometer	
Flugstrecke der Elektronen	3,3 cm
Flugstrecke der $He^+$ -Ionen	26,35 cm
Elektrische Feldstärke	1,94 V/cm für $E_\gamma < 78,5$ eV 1,62 V/cm für $E_\gamma > 78,5$ eV
Temperatur der Gasdüse	25 °C
Entfernung Düse zu Skimmer	10 mm
Durchmesser des Skimmereingangs	$\varnothing = 0,3$ mm
Spektrometerabschlußgitter	Maschenweite=0,2 mm (70% Transmission)
Distanz Skimmerloch zu Targetzone	$L_{Target} = 8$ cm.
Innenradius der Kupferplatten	4,2 cm.
Abstand Gitter/ $e^-$ -Detektor	6 mm
Abstand Gitter/ $He^+$ -Detektor	13 mm
Energieaufl. der kinetischen Energien	Siehe Abb. 5.12, S. 67
Impulsaufösung	$\Delta p_e \approx 17 \cdot 10^{-3}$ a.u. (FWHM)

Kalibrierung der Photonenenergie	
Absolute Kalibrierung der Energie $E_\gamma$	besser als 4 meV
Photonenenergieauflösung $\Delta E_\gamma$	besser als 3,9 meV
Breite des Photonenstrahls im Fokus	$\Delta F_{hor} < 0,25$ mm (FWHM) $\Delta F_{ver} < 0,2$ mm (FWHM)
Polarisationsgrad (Stokesparameter $S_1$ )	$S_1 = 1,0 \pm 1,8 \cdot 10^{-3}$



<b>Vakuumsystem und Jet</b>	
Vordruck Helium	30 bar
Düsendurchmesser	$<30 \mu\text{m}$ (wegen Ablagerungen)
Gesamtpumpleistung Hauptkammer	960 l/s
Pumpleistung Jetdump	220 l/s
Pumpleistung Expansionskammer	2200 l/s mit 500 l/s Nachkompression
Druckanstieg im Jetdump*	$3,5 \cdot 10^{-6}$ mbar
Druckanstieg in der Hauptkammer*	$1,1 \cdot 10^{-6}$ mbar
Lokaler Druck in der Reaktionszone*	$1,2 \cdot 10^{-4}$ mbar
Druck in der Expansionskammer*	$1,2 \cdot 10^{-3}$ mbar

\* Kalibriert für Helium

<b>Detektorraten</b>	
Ringstrom	5,49 mA (der maximale Ringstrom betrug 16 mA)
Spiegelstrom hinter Monochromator	121,1 pA
$e^-$ -Detektor	37670 Hz
$He^+$ -Detektor	17500 Hz
Verhältnis $e^-/He^+$	2,15 : 1 (später eher 3 : 1 wegen niedrigerer Targetdicht auf- grund von Ablagerungen in der Düse)
Koinzidenzen	4100 Hz
Totzeit der Datenaufnahme	keine

Meßzeiten und aufgenommene Statistik	
Verhältnis zwischen $He^+$ -Ionen aus Reaktionszone und Untergrund: 5 : 1	
78,179 eV < $E_\gamma$ < 78,5 eV	Spektrometerfeld: 1,94 V/cm Schrittweite: 3 meV Aufgenommene Ereignisse pro Schritt: ca. $7,3 \cdot 10^6$ Davon $He^+$ -Ionen aus Reaktionszone: ca. $6,07 \cdot 10^6$ Meßdauer* pro Schritt: 35 bis 90 Minuten
78,5 eV < $E_\gamma$ < 78,815 eV	Spektrometerfeld: 1,62 V/cm Schrittweite: 3 meV Aufgenommene Ereignisse pro Schritt: ca. $1,08 \cdot 10^6$ Davon $He^+$ -Ionen aus Reaktionszone: ca. $0,9 \cdot 10^6$ Meßdauer* pro Schritt: 6 bis 13 Minuten
78,815 eV < $E_\gamma$ < 78,9 eV	Spektrometerfeld: 1,62 V/cm Schrittweite: 3 meV Aufgenommene Ereignisse pro Schritt: ca. $10,54 \cdot 10^6$ Davon $He^+$ -Ionen aus Reaktionszone: ca. $8,76 \cdot 10^6$ Meßdauer* pro Schritt: 45 bis 120 Minuten

\* Die Meßdauer war abhängig von der Strahlintensität (d.h. vom Ringstrom).

# Literaturverzeichnis

- [1] H. Pointcaré *Acta Math.* **VIII**, (1886), S. 295
- [2] H. Pointcaré *Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste*, Gauthier-Villars, Paris, (1892)
- [3] O. Bohigas, M. J. Giannoni und C. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **52**, (1984), S. 1
- [4] J.-P. Connerade, *J. Phys. B* **30**, (1996), L31
- [5] J. Zakrzewski, K. Dupret und D. Delande *Phys. Rev. Lett.* **74**, (1995), S. 522
- [6] G. Tanner, K. Richter, J.-M. Rost *Rev. Mod. Phys.* **73**, (2000), S. 497
- [7] J.-M. Rost, K. Schulz, M. Domke und G. Kaindl *J. Phys. B* **30**, (1997), S. 4663
- [8] R. P. Madden und K. Codling, *Phys. Rev. Lett.* **10**, (1963), S. 516
- [9] R. P. Madden und K. Codling, *Astrophys. J.* **141**, (1965), S. 364
- [10] R. Whiddington und H. Priestley, *Proc. Roy. Soc.* **A145**, (1934), S. 462
- [11] E. N. Lassetre und S. Silverman, *Suppl. Radiation Research* **1**, (1959), S. 530
- [12] H. Beutler, *Z. Physik* **93**, (1935), S. 177
- [13] J. W. Cooper, U. Fano und F. Prats, *Phys. Rev. Lett.* **10**, (1963), S. 518
- [14] L. Lipsky und A. Russek, *Phys. Rev.* **142**, (1966), S. 59
- [15] D. R. Herrick und O. Sinanöglu, *Phys. Rev. A* **11**, (1975), S. 97
- [16] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, (1961), S. 1866
- [17] U. Fano und J. W. Cooper, *Phys. Rev. A* **137**, (1965), S. 1364
- [18] U. Fano, *Nuovo cimento* **12**, (1935), S. 156
- [19] H. A. Bethe, *Handbuch der Physik (Springer-Verlag, Berlin)*, Vol. **24**, (1933), S.483
- [20] J. Cooper und R. N. Zare *J. Chem. Phys.* **48**, (1968), S. 942

- [21] V. Schmidt, *Rep. Proc. Phys.* **55**, (1992), S. 1483
- [22] H. R. Sadeghpour und C. H. Greene, *Phys. Rev. Lett.* **65**, (1990), S. 313
- [23] C. D. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **51**, (1983), S. 1348
- [24] C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **29**, (1984), S. 1019
- [25] J. M. Feagin und J. S. Briggs, *Phys. Rev. Lett.* **57**, (1986), S. 984
- [26] J. M. Feagin und J. S. Briggs, *Phys. Rev. A* **37**, (1988), S. 4599
- [27] H. S. W. Massey und C. B. O. Mohr, *Proc. Roy. Soc. A* **136**, (1932), S. 289
- [28] H. S. W. Massey, *Rev. Mod. Phys.* **28**, (1956), S. 199
- [29] P. G. Burke, D. D. McVicar und K. Smith, *Physics Letters* **12**, (1964), S. 215
- [30] P. G. Burke, D. D. McVicar und K. Smith, *Proc. Phys. Soc.* **84**, (1964), S. 749
- [31] P. G. Burke, D. D. McVicar und K. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **11**, (1963), S. 559
- [32] P. G. Burke und D. D. McVicar, *Proc. Phys. Soc.* **86**, (1965), S. 989
- [33] P. G. Burke, D. F. Gallaher und S. Geltman, *J. Phys. B* **2**, (1969), S. 1142
- [34] I. Bray, *Phys. Rev. A* **46**, (1992), S. 6995
- [35] I. Bray, D. V. Fursa, A. S. Kheifets und A. T. Stelbovics *J. Phys. B* **35**, (2002), S. R117
- [36] E. P. Wigner und L. Eisenbud, *Phys. Rev.* **72**, (1947), S. 29
- [37] M. Aymar, C. H. Greene und E. Luc-Koenig, *Revs. Mod. Phys.* **68**, (1996), S. 1015
- [38] A. M. Lane und R. G. Thomas, *Revs. Mod. Phys.* **30**, (1958), S. 257
- [39] U. Fano und C. M. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **31**, (1973), S. 1573
- [40] A. Buchleitner, B. Grémaud und D. Delande, *J. Phys. B* **27**, (1994), S. 2663
- [41] E. Balslev und J. M. Combes, *Commun. Math. Phys.* **22**, (1971), S. 280
- [42] G. D. Doolen, J. Nuttall, R. W. Stagat, *Phys. Rev. A* **10**, (1974), S. 1612
- [43] M. Domke, G. Remmers und G. Kaindl, *Phys. Rev. Lett.* **69**, (1992), S. 1171
- [44] M. Domke, K. Schulz, G. Remmers und G. Kaindl, *Phys. Rev. A* **53**, (1996), S. 1424
- [45] K. Schulz, G. Kaindl und M. Domke, *Phys. Rev. Lett.* **77**, (1996), S. 3086

- [46] R. Püttner, B. Grémaud, D. Delande, M. Domke, M. Martins, A. S. Schlachter und G. Kaindl, *Phys. Rev. Lett.* **86**, (2001), S. 3747
- [47] Y. H. Jiang, R. Püttner, R. Hentges, J. Viefhaus, M. Poiguine, U. Becker, J. M. Rost und G. Kaindl, *Phys. Rev. A* **69**, (2004), S. 042706
- [48] P. A. Heimann, U. Becker, H. G. Kerkhoff, B. Langer, D. Szostak, R. Wehlitz, D. W. Lindle, T. A. Ferret und D. A. Shirley, *Phys. Rev. A* **34**, (1986), S. 3782
- [49] R. I. Hall, L. Avaldi, G. Dawber, M. Zubek, K. Ellis und G. C. King, *J. Phys. B* **24**, (1991), S. 115
- [50] G. C. King, M. Zubek, P. M. Rutter und F. H. Read, *J. Phys. E* **20**, (1987), S. 440
- [51] M. Zubek, G. C. King, P. M. Rutter und F. H. Read, *J. Phys. B* **22**, (1989), S. 3411
- [52] M. Zubek, G. Dawber, R. I. Hall, L. Avaldi, K. Ellis und G. C. King, *J. Phys. B* **24**, (1991), L337
- [53] D. W. Lindle, T. A. Ferret, U. Becker, P. H. Kobrin, C. M. Truesdale, H. G. Kerkhoff und D. A. Shirley *Phys. Rev. A* **31**, (1985), S. 714
- [54] M. G. White, R. A. Rosenberg, G. Gabor, E. D. Poliakoff, G. Thornton, S. H. Southworth und D. A. Shirley, *Rev. Sci. Instrum.* **50**, (1979), S. 1268
- [55] A. Menzel, S. P. Frigo, S. B. Whitfield, C. F. Caldwell, M. O. Krause, J.-Z. Tang und I. Shimamura, *Phys. Rev. Lett.* **75**, (1995), S. 1479
- [56] A. Menzel, S. P. Frigo, S. B. Whitfield, C. F. Caldwell und M. O. Krause, *Phys. Rev. A* **54**, (1996), S. 2080
- [57] M. O. Krause, T. A. Carlson und P. R. Woodruff, *Phys. Rev. A* **24**, (1981), S. 1374
- [58] D. Wintgen und D. Delande, *J. Phys. B* **26**, (1993), L399
- [59] I. Sánchez, F. Martin, *J. Phys. B* **23**, (1990), 4263  
und *Phys. Rev. A* **44**, (1991), S. 7318
- [60] R. Dörner, H. Bräuning, J. M. Feagin, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, T. Vogt, H. Khemliche, M. H. Prior, J. Ullrich, C. L. Cocke und H. Schmidt-Böcking, *Phys. Rev. A* **57**, (1998), S. 1074
- [61] C. H. Greene, *Phys. Rev. Lett.* **44**, (1980), S. 869
- [62] R. Dörner, J. M. Feagin, C. L. Cocke, H. Bräuning, O. Jagutzki, M. Jung, E. P. Kanter, H. Khemlich, S. Kravis, V. Mergel, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, L. Spielberger, J. Ullrich, M. Unverzagt und T. Vogt, *Phys. Rev. Lett.* **77**, (1996), S. 1024

- [63] J. P. Toennies und K. Winkelmann, *J. Chem. Phys.* **66**, (1977), S. 3965
- [64] T. Schneider, C.-N. Liu und J.-M. Rost, *Phys. Rev. A* **65**, (2002)
- [65] Doktorarbeit von Th. Weber, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2003)
- [66] Doktorarbeit von V. Mergel, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [67] Doktorarbeit von M. Achler, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1999)
- [68] Doktorarbeit von T. Jalowy, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2003)
- [69] Doktorarbeit von M. Hattas, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2004)
- [70] Diplomarbeit von Tobias Vogt, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [71] Diplomarbeit von Markus Schöffler, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2002)
- [72] D. L. Williams, F. H. Read, N. J. Bowring, XVIIIth ICPEAC, Book of Abstracts, Band 2, (1993), Seite 881
- [73] T. Ericson, *Phys. Rev. Lett.* **5**, (1960), S. 430
- [74] J. Main und G. Wunner, *Phys. Rev. Lett.* **69**, (1992), S. 586
- [75] J. Main und G. Wunner, *J. Phys. B* **27**, (1994), S. 2835
- [76] S. N. Pisharody und R. R. Jones, *Science* **303**, (2004), S. 813



# Index

- Ablenkanalysatoren, 26
- Ablenkmagnet, 109
- Abstrahlcharakteristik, 109
- Anode, 44
- Asymmetrieparameter, 20, 25, 27, 63
- Aufnahmerate, 50
- Autokorrelationsfunktion, 82
  
- Beamdump, 34
- Beta-Parameter, 20, 25, 27, 63
- Beugung am Gitter, 113
- Bragg-Beziehung, 113
- Branching Ratio, 73
- Bunchmarker-Signal, 48
  
- CERN, 100
- CFD, 48
- Close-Coupling, 17
- Coltrims, 32, 41, 97
- Complex-Rotation, 14, 20
- Constant-Fraction-Diskriminatoren, 48
  
- Düse, 37
- Datenauswertung, 52
- Delayline-Prinzip, 44
- Detektoren, 43
- Detektorspannungen, 46
- Differentielle Pumpstufe, 33
- Differenzverstärker, 48
- Dipolnäherung, 20
- Dipolverteilung, 21, 63, 103
- Doppelt angeregte Zustände, 5
- Double-Bunch-Modus, 109
  
- Eichmessung, 58, 65
- Eigenchannel R-Matrix, 19
- Elektronenstrahl, 108
- Energieauflösung, 47, 65, 113
- Erdmagnetfeld, 53, 61
- Ericson-Fluktuationen, 82
  
- Expansionszone, 37
  
- Fano-Profil, 11, 65
- Flächenbelegungsdichte, 39
- Flugzeitspektrometer, 24
  
- Gap, 111, 113
- Gasjet, 36
- Gaszelle, 22
- Gitterbeugung, 113
- Greene (Theorie), 92
  
- Hartree-Fock-Methode, 6
- Hypersphärische Näherung, 16
  
- Impulsberechnung, 53
- Impulserhaltung, 54, 68
- Interne Temperatur des Gasjets, 39
  
- Jet, 36
- Jetgeschwindigkeit, 37
  
- Kühlung des Jets, 39
- Kalibrierung, 58
- kohärente Überlagerung (Undulator), 111
- Koinzidenzschaltung, 48, 68
- kontinuierlicher Strahlmodus, 109
- Konversionsfaktor für Helium, 40
- Koordinatensystem, 52
- Kristallmonochromator, 113
  
- Laser, 99
- Leading-Edge-Diskriminator, 48
- Lecherleitung, 44, 48
- Lorentzkurve, 82
  
- Madden und Codling, 22
- Magnetfeld, 53, 61
- MCP-Detektoren, 43
- Meßplatz, 47
- Menzel *et al.*, 27



- Microchannelplates, 44  
Mikrotron, 108  
Molekular-adiabatische Näherung, 16  
Monochromator, 51, 111  
Monochromatorsteuerung, 48  
Monte-Carlo-Simulation, 100  
  
Nachbeschleunigung, 46  
Nachweiseffizienz, 46  
NIM-Signale, 48  
  
Ortsauflösung, 101  
Ortsnullpunkt, 59  
  
Partielle Wirkungsquerschnitte, 24, 79  
Photonenfluß, 47  
Polarisationsgrad, 21, 47, 63, 64  
Polarisationsvektor, 21  
Pulsdauer, 109  
  
Quantenzahlen  $(K, T)^A$ , 13  
  
R-Matrix, 19, 83  
ROOT, 100  
Runge-Lenz-Vektor, 16  
  
Sekundärelektronen, 44, 68  
Signalverarbeitung, 48  
Silizium-Diode, 39  
Simulation, 100  
Single-Bunch-Modus, 109  
Skimmer, 37  
Speedratio, 39, 103  
Speicherring, 108  
Spektrometer, 40  
Stokesparameter, 21, 63, 64  
Strahlführung, 33  
Strahlmonitor, 34  
Symmetrie der Impulsverteilung, 58  
Synchrotron, 47, 107  
  
Tabellen, 116  
Targetdichte, 39  
TDC, 48  
Technische Daten, 116  
Time-to-Digital-Konverter, 48  
Totaler Wirkungsquerschnitt, 9, 22, 74  
  
Untergrundreduktion, 66  
Vakuumsystem, 35  
  
Wannier, 93  
Wiggler, 109  
  
Zeitnullpunkt, 59  
Zone of Silence, 37, 40  
  
Undulator, 47, 109

*... Wer hat an der Uhr gedreht? ...*

Die vorliegende Dissertation beschreibt lediglich die wissenschaftliche Seite dieser Doktorarbeit. Am Tag der Promotion werde ich im Mittelpunkt stehen, und man wird mich zu der vollendeten Arbeit beglückwünschen. All die Arbeit, die von anderen Menschen geleistet wurde, um diesen Tag für mich zu ermöglichen, ist bisher nicht erwähnt worden. Das möchte ich auf den folgenden Seiten tun.

Ganz herzlich danken möchte ich den „Beschleunigern“ Herrn Schneider, Herrn Dilfer, Herrn Ziel und Herrn Baumgarten. Wie oft kam es vor, daß ich auf der Suche nach irgendeinem exotischen Spezialbauteil umhergeirrt bin und schließlich Hilfe bei der Beschleunigermannschaft fand. Ohne Ausnahme ließen sie immer alles sofort stehen und liegen, um selbst die verstecktesten Winkel und Ecken des Instituts zu durchsuchen. Während meiner gesamten Zeit im IKF habe ich es nicht ein einziges mal erlebt, daß sie mir nicht auf der Stelle und mit größtem Einsatz geholfen hätten.

Das gleiche gilt für die Menschen in der Werkstatt. Allen voran möchte ich Herrn Zanger und Herrn Schwab danken. Herr Schwab hat nahezu alle Teile meines Experiments angefertigt - vom Spektrometer angefangen bis hin zum Kammergestell. Seiner Aufmerksamkeit, seinem Geschick und seiner Geduld ist es zu verdanken, daß trotz teilweise recht nebulöser Konstruktionspläne meinerseits letztendlich immer erstklassige Bauteile entstanden. Zum Ende 2002 mußte beispielsweise die Jahresreinigung der Werkstattmaschinen verzögert werden, damit Herr Schwab wichtige Teile für mich anfertigen konnte - wofür er im übrigen sogar seinen Urlaub verschoben hat.

Besonderen Dank schulde ich unserer Arbeitsgruppe - weit mehr, als dies eventuell bei anderen Doktorarbeiten der Fall ist. Dies hängt zusammen mit der speziellen Art der Messungen, die nicht im IKF möglich waren, sondern an den Synchrotronanlagen in Hamburg und Berlin erfolgen mußten. Während dieser „Strahlzeiten“ muß das gesamte Experiment innerhalb weniger Tage aufgebaut und in Betrieb genommen werden. Anschließend muß über etliche Tage ein 24-Stunden-Betrieb aufrecht erhalten werden, um die zugewiesene Strahlzeit vollständig zu nutzen. Ein geordneter Tag/Nacht-Rhythmus und Schlaf sind eher die Ausnahme und Schichten von 18 Stunden vor allem am Anfang einer Strahlzeit die Regel.<sup>1</sup> Fast alle Mitglieder der Gruppe haben mich auf der einen oder anderen Strahlzeit begleitet und die entsprechenden Strapazen auf sich genommen. Danke Totti, Markus, Till, Sven, Mirko, Matthias, Jasmin, Christine, Andre, Susanne, Robert und Stefan, daß Ihr das für mich getan habt.

In diesem Zusammenhang möchte ich Martin Trummel danken, der innerhalb der letzten drei Tage vor meiner ersten Strahlzeit die komplette CAMAC-Auslese programmiert hat. Besonders erwähnen möchte ich Markus Schöffler. Er hat mit seiner Hilfsbereitschaft, seinem außergewöhnlichen technischen Talent, seinem Einsatz und nicht zuletzt mit seiner unzerrüttbaren guten Laune<sup>2</sup> zum Gelingen des Experiments beigetragen. Markus, Deine fröhliche Art ist etwas ganz Besonderes. Neben Markus haben Sven Schöffler und Till Jahnke (Mr. Nachtschicht) am meisten Zeit auf meinen Strahlzeiten verbracht. Danke Till, daß Du damals „grad’ mal eben schnell“ ein Multi-Hit-Digital-Delay für mich gebaut hast. Deine Geschichten und vor allem die Art, wie Du sie erzählen kannst, haben mich (uns alle) vor so machem akuten Depressionsanfall gerettet. Wahrscheinlich habe ich nur deshalb unsere Schicksalsfahrt nach Riezlern ohne bleibende Schäden überstanden.

---

<sup>1</sup>Daher ist „Strahlzeit“ im Grunde genommen nur ein anderes Wort für „Hölle“.

<sup>2</sup>Markus’ gute Laune ist legendär: Selbst nachdem wir (mal wieder) ca. 18 Stunden durchgeackert hatten, und sich das Experiment - davon völlig unbeeindruckt - dazu anschickte, nun völlig zusammenzuberechnen, *hat er immer noch Späße gemacht!*

Riezlern forever! Danke Sven für Deine unübertroffene Zuverlässigkeit und dafür, daß Du immer mitdenkst. Ich glaube, das wird zu selten beachtet. Wenn Du gesagt hast, daß Du Dich um etwas kümmerst, dann konnte ich beruhigt die Kontrolle abgeben, obwohl mir das sonst eher schwer fällt. Sorge bitte in meinem Namen dafür, daß die anderen nicht das Mülltrennen verlernen.

Thorsten Weber hat mich während meiner ersten Zeit im Institut bei der Hand genommen und mir die Geheimnisse des IKF gezeigt. „Guck mal Achim, das hier ist der Tiefkeller... und das hier ist der Schrank von den Beschleunigern, wo Du immer gute O-Ringe findest. Aber immer nett fragen, gell.“ Totti, Du warst unser Gruppenpapa und hast eine riesen Lücke hinterlassen als Du weggegangen bist.

Ottmar Jagutzki und Lothar Schmidt gehören zum Urgestein der Gruppe. Von Ottmar und Lothar habe ich bis zuletzt viel gelernt. Oft entwickelten sich kleine, unscheinbare Fragen zu ausgewachsenen Diskussionen. Am Ende rauchte mir zwar fast immer der Kopf, aber ich war um einiges Wissen reicher. Insbesondere während der Vorbereitungsphasen vor den Strahlzeiten haben beide viel Verständnis und Hilfsbereitschaft gezeigt. Zusammen mit Ottmar habe ich in letzter Zeit an vielen Projekten gearbeitet. Ottmar, das „Arbeiten“ mit Dir hat mir immer viel Spaß gemacht. Vielen Dank auch für die tollen Reisetips!

Insbesondere bei allen Fragen rund um Computer im Allgemeinen und C++, Postscript und PAW im Speziellen haben mir Klaus Ullmann und Alkis Müller viel geholfen. Klaus, ich wünsche Dir „Friede und langes Leben!“

Danke Andre, Mirko und Matthias für das nette Zusammensein in unserem kleinen Zimmer. Ich werde die „hoch geistigen“ Gespräche über den Rand unserer Monitore hinweg vermissen. Manuel, Robert und Sven - denkt an mich, wenn Ihr in Zukunft Pasta kocht und Latte M. zelebriert.

Horst Schmidt-Böcking und Reinhard Dörner möchte ich für die Aufnahme in die Gruppe und all die Unterstützung danken, die sie mir in den letzten Jahren haben zukommen lassen. Ihre besondere Art, mit Menschen umzugehen, wird mir immer in Erinnerung bleiben. Sie sehen grundsätzlich die besten Eigenschaften in den Menschen. Wo andere Druck ausüben, erreichen sie weit mehr durch Motivieren und Chancen geben. Reinhard, bei Dir steht die Tür für alle immer offen. Du hast stets Zeit für uns. Selbst im größten Streß widmest Du Deinem Gegenüber Deine 100%-tige Aufmerksamkeit. Du findest immer eine Lösung oder hast eine aussichtsreiche Idee, so daß man sich selbst in scheinbar ausweglosen Situationen niemals alleine fühlt.

Horst, ich kenne niemanden, der den Titel „Doktorvater“ eher verdient hätte als Du. Du bist in jeder Hinsicht das Herz der Gruppe.

Das allergrößte Glück für mich ist es jedoch, in meiner Familie aufgewachsen zu sein. Angefangen mit einer wunderbaren Kindheit bis hin zum heutigen Tag haben meine Eltern alles dafür getan, damit ich ein glückliches Leben habe. Das haben sie mit Erfolg geschafft.

Tanja hat mich während aller Phasen meiner Doktorarbeit begleitet und alle Ups und Downs miterlebt. Durch sie hatte ich auch während der anstrengendsten Abschnitte immer ein Leben außerhalb der Physik. Danke für die letzten vier Jahre, für den seelischen Beistand, für die Wärme und für die Tatsache, daß Du mit so viel Zuversicht und Vorfreude an unsere verrückten Zukunftspläne glaubst.

Haaaalt, Stop! Das hier ist kein Abschied.

Wir nehmen zwar eine kurze Auszeit, aber ...

*Heute ist nicht alle Tage, ich komm' wieder - keine Frage!*



## Lebenslauf

**Geburtsdatum:** 09.06.1976 in Frankfurt am Main

**Grundschule:** 1982 - 1986, Kerschensteiner Schule, Frankfurt a. M.

**Gymnasium:** 1986 - 1995, Liebigschule, Frankfurt a. M.

**Abiturprüfung:** Juni 1995, Liebigschule, Frankfurt a. M., Gesamtnote 1,3

**Studienbeginn:** Oktober 1995, J. W. Goethe-Universität, Frankfurt a. M.

**Vordiplom:** April 1997 (3. Sem.), J.W. Goethe-Univ. Frankfurt a. M.  
Beurteilung: Sehr gut

**Diplom:** März 2000, Institut für Kernphysik, J.W.G.-Universität  
Frankfurt a. M., Beurteilung: Sehr gut mit Auszeichnung

**Promotion** Beginn im April 2000 am Institut für Kernphysik der  
J.W.G.-Universität, Disputation am 28.05.2004  
Beurteilung: Sehr gut mit Auszeichnung

## Auszeichnungen und Stipendien

1995	Liebigschulpreis
1995	Schülerpreis der chemischen Industrie
1997	Aufnahme in die Studienstiftung des Deutschen Volkes
2001	Auszeichnung der Diplomarbeit mit dem Philipp Siedler Preis des Frankfurter Physikalischen Vereins
2002	Stipendium der Graduiertenförderung der Universität Frankfurt

## Auslandsaufenthalte

Sep. 1998	10 Monate	Lawrence Laboratory, Berkeley, USA
Apr. 2000	6 Wochen	Spring8-Synchrotron, Riken, KEK, Sendai, Japan
Nov. 2000	3 Wochen	Centro Atomico de Bariloche, Argentinien
Feb. 2002	2 Wochen	Stevens Institute of Technology, New York

## Praktika

Aug. 1997	6 Wochen	Privat organisiertes Praktikum an der GSI in Darmstadt
-----------	----------	--